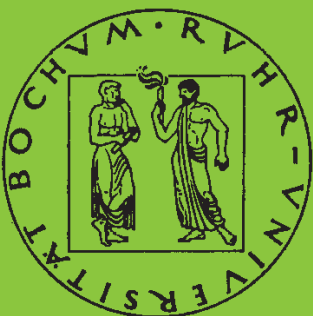


Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik

Rainer Fichte-Heinen

**Mikromechanische Modellierung von
Formgedächtnismaterialien**

Heft Nr. 141



RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM

Dissertation

**Mikromechanische Modellierung von
Formgedächtnismaterialien**

Zur Erlangung des akademischen Grades

Dr.-Ing.

vorgelegt der

Fakultät für Maschinenbau

an der Ruhr-Universität Bochum

von

Rainer Fechte-Heinen,
geb. 09.08.1979 in Werne an der Lippe

Bochum 2007

Datum der Einreichung: 2.5.2007

Mündliche Prüfung: 12.06.2007

1. Gutachter: Prof. Dr. rer. nat. Klaus Hackl

2. Gutachter: Prof. Dr.-Ing. Gunther Eggeler

Vorsitzender der Prüfungskommission: Prof. Dr.-Ing. Michael Pohl

Herausgeber:

Institut für Mechanik
— Schriftenreihe —
Ruhr-Universität Bochum
D-44780 Bochum

Dieses Werk ist urheberrechtlich geschützt. Die dadurch begründeten Rechte, insbesondere die der Übersetzung, des Nachdrucks, des Vortrags, der Entnahme von Abbildungen und Tabellen, der Funksendung, der Mikroverfilmung oder der Vervielfältigung auf anderen Wegen und der Speicherung in Datenverarbeitungsanlagen, bleiben, auch bei nur auszugsweiser Verwertung, vorbehalten. Eine Vervielfältigung dieses Werkes oder von Teilen dieses Werkes ist zulässig. Sie ist grundsätzlich vergütungspflichtig. Zuwiderhandlungen unterliegen den Strafbestimmungen des Urheberrechtsgesetzes.

©2007 Institut für Mechanik der Ruhr-Universität Bochum

Printed in Germany

Zusammenfassung

Die vorliegende Arbeit beschäftigt sich mit der energetischen Modellierung von Formgedächtnislegierungen. Auf Grund der Fähigkeit dieser Werkstoffe, auf äußere Lasten durch Ausbildung einer martensitischen Mikrostruktur zu reagieren, ist die Modellierung des zugehörigen Materialverhaltens aufwändiger als die herkömmlicher Materialien.

Insbesondere ist die in phasentransformierenden Materialien durch Mikrostrukturausbildung erreichbare Verringerung der Energiedichte nicht exakt bekannt, wenn mehr als drei kristallographische Varianten vorliegen. In dieser Arbeit wird die Qualität vorhandener unterer Grenzen als Abschätzung der Energiedichte monokristalliner Materialien durch Vergleich mit bekannten und neu entwickelten oberen Grenzen validiert. Hierbei wird die größte Übereinstimmung zwischen oberen und unteren Grenzen, und damit die genaueste Eingrenzung der tatsächlichen Energiedichte, durch Laminatgrenzen zweiter Ordnung erreicht, welche den Effekt der martensitischen Zwillingsbildung zur Steigerung der numerischen Effizienz berücksichtigen.

Es folgt die Erweiterung der Betrachtung auf polykristalline Materialien. Im Rahmen dieser Verallgemeinerung werden weitere Aspekte wie das hysteretische Spannungs-Dehnungsverhalten sowie der Einfluss von fertigungsbedingten Vortexturen und anisotropen Materialeigenschaften der austenitischen und martensitischen Varianten einbezogen.

Anhand von experimentellen Texturdaten wird abschließend das Materialverhalten eines realen polykristallinen Probenkörpers simuliert. Die wesentliche innere Variable des mikromechanischen Modells, nämlich die Orientierungsdichteverteilung des Martensits, wird durch den Vergleich mit Beobachtungen aus Synchrotronbeugungsversuchen validiert.

Summary

This thesis deals with the energetic modeling of shape memory alloys. Such materials are capable of reacting by formation of martensitic microstructures when subjected to outer loads. This is why their modeling requires higher effort than that of commonly used materials.

The energy reduction reached by forming microstructures is not known exactly for phase transforming materials in the case of more than three crystallographic variants. In this work, the quality of lower bounds to the energy of monocrystalline materials is evaluated by comparison with previously known and newly derived upper bounds. Best agreement of upper and lower bounds, and thus the most accurate estimate of the actual energy density, is achieved by second order lamination bounds taking the martensitic twinning effect into account for better numeric efficiency.

Furthermore, polycrystalline shape memory materials are considered. In the course of this generalization of the model developed before, additional aspects such as the hysteretic stress-strain behavior as well as the influence of pre-textures caused by the production process and the anisotropic material properties of the austenitic and martensitic variants are included.

Finally, the material behavior of an actual polycrystalline specimen is simulated on the basis of experimentally measured texture data. The main internal variable of the micromechanical model, that is to say the orientation distribution of the martensite, is validated by comparison to observations from synchrotron diffraction experiments.

Vorwort

Die vorliegende Arbeit ist im Rahmen meiner wissenschaftlichen Tätigkeit am Lehrstuhl für Allgemeine Mechanik der Ruhr-Universität Bochum bei Herrn Prof. Dr. K. Hackl entstanden. Durch die Einbindung in den Sonderforschungsbereich 459 bin ich in den Vorzug eines multi-disziplinären Umfeldes aus den Bereichen der Ingenieur- und Naturwissenschaften, aber auch der Medizin, gekommen, aus dem zahlreichen Impulse und auch verschiedene Kooperationen entstanden sind.

Ich möchte an dieser Stelle zunächst meinen Dank für die Betreuung meiner Forschungsarbeit durch Prof. Dr. Hackl ausdrücken. Dieser hat schon im Grundstudium meine Begeisterung für das Fach Mechanik geweckt und nicht zuletzt auch durch die Betreuung meiner Projektarbeit und die Vermittlung meiner Diplomarbeit mein Interesse an der mikromechanischen Modellierung im Allgemeinen und den Formgedächtnislegierungen im Besonderen gefördert. Meine Tätigkeit an seinem Lehrstuhl war in Forschung und Lehre durch die Freiheit, eigene Ideen einzubringen, und die Sicherheit, immer ein offenes Ohr für Fragen zu finden, geprägt.

Weiterhin gilt mein Dank auch Herrn Prof. Dr. G. Eggeler. Dieser hat durch seine engagierte Tätigkeit zum Einen als Hochschullehrer der Werkstoffwissenschaften im Grundstudium und zum Anderen als Sprecher des SFB 459 für viele Studierende und Promovierende die Möglichkeit geschaffen, sich in angenehmem und inspirierendem Umfeld mit dem weiten Feld der Materialmodellierung zu beschäftigen. Zudem hat er sich freundlicher Weise bereit erklärt, als zweiter Gutachters dieser Arbeit tätig zu werden.

Besonders dankbar bin ich auch für die gute Zusammenarbeit mit meinen Kollegen vom Lehrstuhl für Allgemeine Mechanik der Ruhr-Universität Bochum. Nicht nur die stete Bereitschaft zur fachlichen Diskussion, sondern auch der lockere Umgang miteinander hat die Arbeitsatmosphäre am Lehrstuhl positiv geprägt.

Inhaltsverzeichnis

1. Einleitung	1
2. Grundlagen	5
2.1. Linear elastische isotherme Kontinuumsmechanik	5
2.1.1. Kinematik	5
2.1.2. Konstitutive Gleichungen	9
2.2. Einführung in die Kristallographie	13
3. Elastische Energie monokristalliner Formgedächtnismaterialien	23
3.1. Abschätzung der Mischenergie durch obere und untere Grenzen	25
3.1.1. Untere Reuß-Grenze	25
3.1.2. Untere HI-Maß-Grenze	26
3.1.3. Obere Laminatgrenze 1. Ordnung	27
3.1.4. Obere Laminatgrenze 2. Ordnung	30
3.1.5. Obere Taylorgrenze	35
3.1.6. Unrelaxierte Energie als obere Grenze	36
3.2. Vergleich der Grenzen für feste Volumenfraktionen	36
3.3. Vollständige Relaxierung und energieminimierende Volumenanteile	41
3.3.1. Globale Optimierung, Reuß-Grenze	41
3.3.2. Globale Optimierung, Laminatgrenze zweiter Ordnung	42
3.3.3. Vergleich der Grenzen und energieoptimale Volumenanteile	45
3.4. Vorhersage von Mikrostrukturparametern	59
4. Materialverhalten polykristalliner Formgedächtnismaterialien	67
4.1. Energetische Formulierung	68
4.2. Evolutionsgleichung	71
4.3. Numerische Beispiele	73
4.4. Vorhersage der Texturentwicklung	78
4.5. Experimentelle Validierung	95
5. Zusammenfassung und Ausblick	101
A. Mathematische Kriterien für die Existenz von Energieminima	103
B. Materialdaten	107
B.1. Kubisch \leftrightarrow tetragonal transformierendes NiAl	107
B.2. Kubisch \leftrightarrow orthorhombisch transformierendes CuAlNi	108
B.3. Kubisch \leftrightarrow monoklin transformierendes CuAlNi	109
C. Notation	111

1. Einleitung

Seit ihrer Entdeckung in den Fünfziger und Sechziger Jahren des vergangenen Jahrhunderts haben Formgedächtnismaterialien auf Grund ihres besonderen Materialverhaltens kontinuierlich an Interesse für die Natur- und Ingenieurwissenschaften gewonnen. Mittlerweile ist die Erforschung verschiedener Legierungen, die zu dieser Werkstoffgruppe gehören, ein Thema, mit dem sich eine große Anzahl von Arbeitsgruppen weltweit beschäftigt. Hierbei sind die Interessensschwerpunkte weit gestreut - von der systematischen Suche nach neuen Legierungen mit Formgedächtniseffekt über die Erforschung von Vor- und Nachteilen verschiedener Herstellungs- und Verarbeitungsverfahren bis hin zur konstruktiven Entwicklung neuer Anwendungen.

Die wohl bedeutendsten Aspekte des Materialverhaltens von Formgedächtnislegierungen sind der *Formgedächtniseffekt*, in dessen Zusammenhang die so genannte *Pseudoplastizität* auftritt, sowie die *Pseudoelastizität*. Der erstgenannte Effekt zeigt sich, wenn man einen Draht oder auch ein komplizierteres Bauteil aus einer entsprechenden Legierung zunächst bleibend verformt und dann erwärmt. Beim Überschreiten einer bestimmten Temperatur, der so genannten *Transformationstemperatur*, springt der Draht in seine ursprüngliche Gestalt vor der Verformung zurück, „erinnert“ sich also an seine vorherige Form.

Das Materialverhalten einer pseudoplastischen Legierung zeigt Abb. 1.1. Wie für Metalle üblich, verläuft die dort dargestellte Spannungs-Dehnungs-Kurve zunächst linear, geht dann aber, ab einer Dehnung von ca. 0,15%, in einen zweiten, annähernd linearen, Bereich weit geringerer Steigung über. Dieser Bereich wird auch als *Spannungsplateau* bezeichnet.

Wird das Material nach Erreichen des Plateaus wieder vollständig entlastet, wie ebenfalls in Abb. 1.1 dargestellt, verbleibt im Material eine deutliche Restdehnung. Diese Restdehnung bildet sich bei Erwärmung des Probenkörpers im Rahmen des bereits erwähnten Formgedächtniseffektes von selbst zurück.

Bei der Verformung eines Drahtes aus pseudoplastischem Material fällt auf, wie leicht sich Formgedächtnismaterialien verformen lassen. Betrachtet man entweder den gleichen Draht bei einer Temperatur leicht oberhalb der Transformationstemperatur oder einen anderen mit abweichender Zusammensetzung, bei dem die Transformationstemperatur niedriger liegt, lässt sich der Effekt der Pseudoelastizität erkennen. Der Draht lässt sich mit relativ geringer Kraft stark dehnen, kehrt aber in seine ursprüngliche Form zurück, sobald die Krafteinwirkung weg fällt. Experimentelle Untersuchungen an verschiedenen Legierungen haben reversible Dehnbarkeiten von über 15% gezeigt.

Eine experimentelle Beobachtung der Pseudoelastizität ist in Abb. 1.2 dargestellt. Wie bei der Pseudoplastizität tritt zunächst auch hier ein Spannungsplateau auf. Bei der Entlastung pseudoelastischer Materialien ist allerdings ein weiteres Spannungsplateau zu beobachten, und ein entlasteter Probenkörper nimmt auch ohne Erwärmung von selbst wieder seine ursprüngliche Gestalt an.

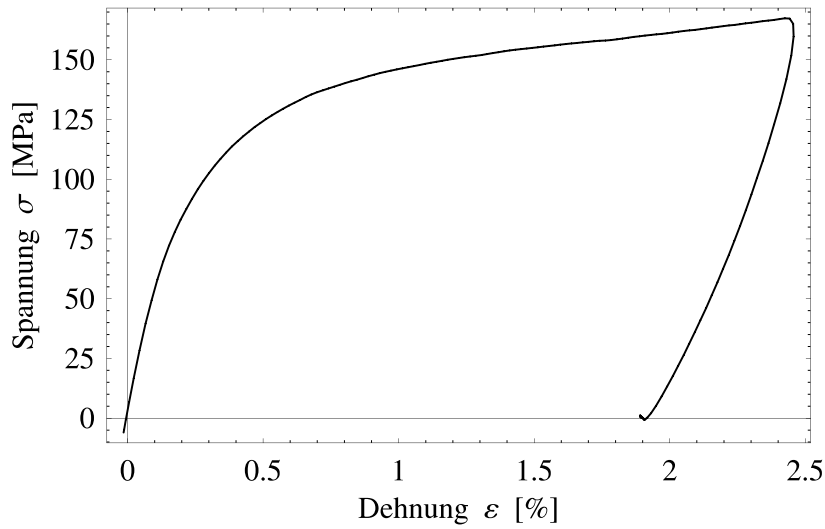


Abbildung 1.1.: Experimentelle Beobachtung des Spannungs-Dehnungs-Verhaltens einer pseudoplastischen Formgedächtnislegierung unter isothermen Bedingungen. Messung von C. Grabe, Grabe (2007).

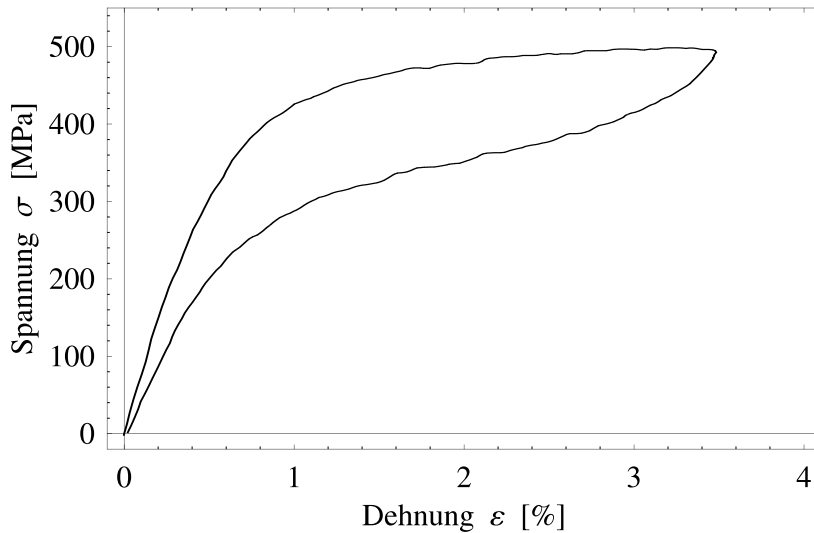


Abbildung 1.2.: Experimentelle Beobachtung des Spannungs-Dehnungs-Verhaltens einer pseudoelastischen Formgedächtnislegierung unter isothermen Bedingungen. Messung von C. Grabe, Grabe and Bruhns (2007) und Grabe (2007).

Sowohl der Formgedächtniseffekt als auch die Pseudoelastizität gehen mit der Ausbildung von *Mikrostrukturen* einher. Dabei verändern Teile des Materials spontan ihre kristalline Struktur. Derartige *Transformationen* sind sowohl zwischen der *Hochtemperaturphase*, dem *Austenit*, und der *Tieftemperaturphase Martensit* als auch zwischen verschiedenen Ausrichtungen des Martensits, seinen so genannten *Varianten*, möglich. Man spricht daher auch von *martensitischen Transformationen* und *Mikrostrukturen*.

Die Fähigkeit, sich durch martensitische Transformationen an Belastungen anzupassen, bedingt aber nicht nur die besondere Flexibilität im Materialverhalten von Formgedächtnismaterialien, sondern erschwert auch die Vorhersage eben dieses Verhaltens. Mit dieser Arbeit soll deswegen durch mikromechanische Modellbildung ein Beitrag zum besseren Verständnis grundlegender Vorgänge in Formgedächtniswerkstoffen geleistet werden. Hierbei wird von möglichst wenigen, physikalisch gut motivierten Kennwerten ausgegangen, um die elastische Energie phasentransformierender Materialien aufzustellen. Unter Verwendung geeigneter Hilfsmittel aus Mathematik, Numerik und Mechanik werden aus dieser energetischen Formulierung grundlegende Aspekte des Materialverhaltens, wie Pseudoelastizität und Pseudoplastizität, abgeleitet.

Die Anwendung der in dieser Arbeit vorgestellten mikromechanischen Modelle zur Simulation komplexer Bauteile ist nur mit erheblichem Rechenzeitaufwand zu realisieren. Für derartige anwendungsnahe Berechnungen sind daher nach derzeitigem Forschungsstand *phänomenologische* Modelle zu bevorzugen, welche die jeweils relevanten Aspekte des Materialverhaltens durch Einführung und Anpassung einer häufig recht großen Anzahl von Parametern abbilden. Die Ursachen der besonderen Eigenschaften der untersuchten Werkstoffe werden in phänomenologischen Modellen zumeist nicht betrachtet. Die hier diskutierten mikromechanischen Modelle eignen sich neben der Erforschung des grundlegenden Materialverhaltens von phasentransformierenden Werkstoffen auch zur Bestimmung von Parametern für phänomenologische Modelle.

Ein Vorteil der mikromechanisch motivierten Betrachtungsweise ist, dass zur Abschätzung des Materialverhaltens lediglich grundlegende Parameter wie Elementarzellengeometrien, elastische Kennwerte und Umwandlungstemperaturen bekannt sein müssen. Hierdurch kann der Zeit- und Kostenaufwand für die Entwicklung neuer Legierungen im Vergleich zur detaillierten experimentellen Untersuchung der Eigenschaften jeder Werkstoffzusammensetzung wesentlich gesenkt werden. Ein weiterer Schritt zur rechnerunterstützten Werkstoffentwicklung ist, auch die vom mikromechanischen Modell benötigten Kennwerte nicht experimentell, sondern durch *ab-initio*-Berechnungen zu bestimmen. Die Mikromechanik nimmt dann eine Brückenfunktion zwischen der atomistischen und der Bauteilskala ein. Die skalenübergreifende Modellierung ist ein bedeutender Themenbereich in der interdisziplinären Werkstoffforschung.

Im folgenden Kapitel werden zunächst die für diese Arbeit erforderlichen Grundlagen der Kontinuumsmechanik und der Kristallographie kurz eingeführt. Die Grundlage des besonderen Materialverhaltens von Formgedächtnislegierungen, nämlich die Transformation von Austenit zu Martensit, wird in diesem Zusammenhang ebenfalls erläutert.

Der dritte Abschnitt befasst sich der Modellierung von einkristallinen Formgedächtnismaterialien. Hierbei liegt der Fokus auf der möglichst genauen Eingrenzung der freien Energiedichte des Materials. In der Literatur wird vielfach eine untere Grenze zur Abschätzung der freien Energiedichte verwendet. Die im Rahmen dieser Arbeit entwickelten oberen Grenzen

bestätigen hierbei die Genauigkeit der zuvor bekannten unteren Grenzen. Zunächst wird die Energiedichte nur für gegebene Volumenanteile ausgewertet, es wird also vorausgesetzt, dass die sich einstellende Verteilung des Materials zwischen Austenit und Martensit a priori bekannt ist.

Diese Voraussetzung wird im weiteren Verlauf des Kapitels durch die übliche Annahme ersetzt, dass sich im Material stets diejenigen Volumenanteile einstellen, welche dessen freie Energiedichte minimieren. Es folgen verschiedene numerische Beispiele zum Vergleich zwischen oberen und unteren Grenzen.

Im vierten Kapitel werden die Betrachtungen auf polykristalline Werkstoffe erweitert. Außerdem wird das Modell um dissipative Aspekte ergänzt. Dadurch wird es möglich, die für Formgedächtnismaterialien typische elastische Hysterese abzubilden. Des Weiteren wird in diesem Kapitel auch der Einfluss von Walztexturen und der Anisotropie der verschiedenen kristallinen Varianten auf das Materialverhalten einbezogen.

Zum Abschluss der Arbeit werden die erzielten Ergebnisse in Kapitel fünf zusammengefasst sowie das weitere Potential und die Grenzen der verwendeten Vorgehensweise diskutiert.

Im Anhang werden schließlich mathematische Bedingungen für die Existenz minimaler Energiezustände diskutiert und die in dieser Arbeit verwendeten Materialdaten sowie die Notation angegeben.

2. Grundlagen

2.1. Linear elastische isotherme Kontinuumsmechanik

Die Beschreibung von dreidimensionalen Problemen erfordert eine vollständig dreidimensionale Formulierung des Materialverhaltens. Das übliche Werkzeug hierfür ist die Kontinuumsmechanik, die in diesem Kapitel kurz eingeführt werden soll. Hierbei werden sich die Betrachtungen auf die in dieser Arbeit benötigten Aspekte beschränken. Insbesondere der Einfluss großer (*finit*) Verformungen sowie thermische Aspekte werden aus Gründen der Kompaktheit eingespart. Der weitergehend interessierte Leser sei auf Standardwerke der Kontinuumsmechanik wie Altenbach and Altenbach (1994), Truesdell (1985) und Gurtin (1981) verwiesen.

Unter einem *Kontinuum* versteht man im Allgemeinen eine Menge von Materiepunkten. Ein zusammenhängendes und begrenztes Kontinuum wird als Körper bezeichnet. Hierbei ist mit *zusammenhängend* gemeint, dass jeder einzelne Materiepunkt mit jedem anderen durch eine Linie, die nicht unbedingt gerade sein muss, verbunden werden kann, wobei alle Punkte dieser Linie selbst auf dem Körper liegen. Ein Körper kann also durchaus auch Bereiche einschließen, die nicht zu diesem Körper gehören. Die *Begrenzung* eines Körpers muss wiederum nicht endlich sein, womit auch unendlich große Körper als Grenzfall betrachtet werden können.

2.1.1. Kinematik

Die *Kinematik* beschreibt die geometrischen Aspekte der Lageveränderung von Materiepunkten eines Körpers. Dabei werden zunächst noch keine Aussagen darüber gemacht, welche Ursachen welche Lageveränderungen im Körper hervorrufen.

Für jeden in der Kontinuumsmechanik betrachteten Körper wird zunächst (mindestens) ein Referenzzustand definiert. Die Wahl des Referenzzustandes ist grundsätzlich zu jedem Zeitpunkt willkürlich; allerdings ist es für die meisten Problemstellungen üblich, einen unbelasteten Zustand als festen Referenzzustand zu wählen. Die Koordinaten eines jeden Punktes P auf dem Körper im Referenzzustand werden durch den Vektor

$$\mathbf{X}_P = \begin{pmatrix} X_{1P} \\ X_{2P} \\ X_{3P} \end{pmatrix} \quad (2.1)$$

repräsentiert. Hierbei liege ein *kartesisches*, also gradliniges und rechtwinkliges, Koordinatensystem zugrunde. Zur Verkürzung der Schreibweise wird ein jeder Punkt im Folgenden mit seinen Koordinaten \mathbf{X} in der Referenzkonfiguration bezeichnet.

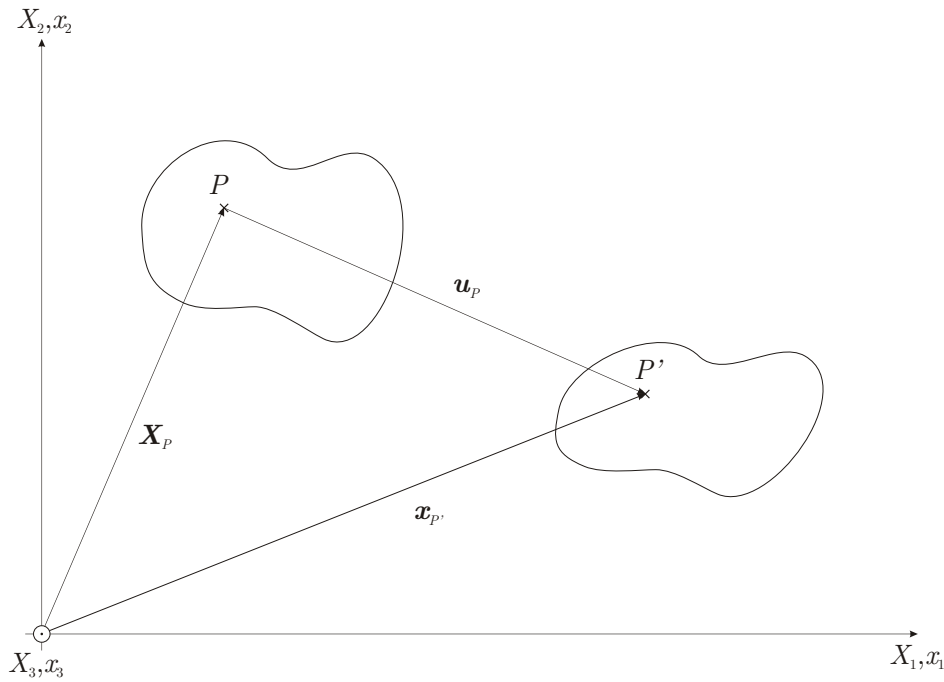


Abbildung 2.1.: Unverformte (\mathbf{X}) und verformte (\mathbf{x}) Konfiguration eines Körpers.

Wird nun die Lage des gesamten Körpers oder die von Punkten auf diesem Körper verändert, geht ein beliebiger Körperpunkt P in der Ausgangskonfiguration in einen Punkt P' in einer neuen, der so genannten *verformten* oder *aktuellen* Konfiguration, über. Dieser Punkt P' hat dann die Koordinaten

$$\mathbf{x}_{P'} = \begin{pmatrix} x_{1P'} \\ x_{2P'} \\ x_{3P'} \end{pmatrix}. \quad (2.2)$$

Die Referenz- und verformte Konfiguration eines Körpers sowie die Punkte P und P' sind in Abb. 2.1 dargestellt.

Einem jeden Materiepunkt können verschiedene Eigenschaften Ξ , wie zum Beispiel die Massendichte des Materials in diesem Punkt, zugeordnet werden. Diese Eigenschaften lassen sich in Abhängigkeit von den Koordinaten der aktuellen Konfiguration

$$\Xi = \Xi(\mathbf{x}) \quad (2.3)$$

beschreiben¹. Eine solche Beschreibung des Körpers entspricht der eines ortsfesten Beobachters, der die Eigenschaften desjenigen Materiepunktes $\mathbf{X}(\mathbf{x}, t)$ misst, welcher sich zu einem Zeitpunkt t gerade am Ort \mathbf{x} befindet. Diese so genannte *Euler'sche* Betrachtungsweise findet insbesondere in der *Strömungsmechanik* Anwendung. Dort ist in der Regel nicht von Interesse, welches Teilchen eines sich in Bewegung befindlichen Kontinuums, eines so genannten *Fluides*, welche Eigenschaftsveränderung erfährt. Vielmehr soll herausgefunden werden, was an einem bestimmten Punkt, beispielsweise am Rand eines Kanals, geschieht – unabhängig davon, welches Teilchen sich dort gerade befindet.

¹Die Zeitabhängigkeit kontinuumsmechanischer Größen wird hierbei und im Folgenden zur Vereinfachung der Notation nicht explizit genannt, da sie für die in dieser Arbeit untersuchten Zusammenhänge nicht von Bedeutung ist.

In der Festkörpermechanik geht es meist darum, welche Veränderungen welcher Teil eines Körpers unter bestimmten äußeren Einflüssen erfährt. Zu diesem Zweck ist es sinnvoller, die Eigenschaften in Abhängigkeit des jeweils beobachteten Materiepunktes

$$\Xi = \Xi(\mathbf{X}) \quad (2.4)$$

zu formulieren. Diese Darstellung, *Lagrange'sche* Betrachtungsweise genannt, wird im Folgenden ausschließlich verwendet.

Die Lageänderung eines Punktes von der unverformten in die verformte Konfiguration wird als *Verschiebung*

$$\mathbf{u}(\mathbf{X}) = \mathbf{x}(\mathbf{X}) - \mathbf{X} \quad (2.5)$$

bezeichnet. Die Abhängigkeit vom betrachteten Punkt \mathbf{X} wird im Folgenden zur Vereinfachung der Notation nicht mehr ausgeschrieben. Die einfachste Form einer Verschiebung ist die nach Betrag und Richtung gleiche Verschiebung aller Punkte eines Körpers, auch *Translation* genannt. Bei einer reinen Translation ändert sich lediglich die Lage eines Körpers im Raum, während die Lage einzelner Punkte relativ zueinander gleich bleibt. Ein weiterer Spezialfall einer Verschiebung ist die reine *Rotation*

$$\mathbf{u} = (\mathbf{X} - \mathbf{X}_0) \times \boldsymbol{\omega}. \quad (2.6)$$

Hierbei wird der gesamte Körper bezüglich einer Achse der Richtung $\boldsymbol{\omega}/|\boldsymbol{\omega}|$, die durch den Punkt \mathbf{X}_0 verläuft, um den Betrag $|\boldsymbol{\omega}|$ gedreht. Dabei ändert sich zwar die relative Lage zweier Punkte im Körper zueinander, nicht aber ihr Abstand voneinander. Die Verschiebungsarten Translation und Rotation werden als *Starrkörperbewegungen* bezeichnet, da sich hierbei lediglich die Lage eines Körpers ändert, während dieser in sich starr bleibt.

In der Festkörpermechanik und damit auch der Materialmodellierung ist nicht die durch Starrkörperbewegungen zu beschreibende Lageveränderung, sondern die relative Verschiebung der Materiepunkte eines Körpers zueinander von Interesse. Daher werden als Maß für die Gestaltänderung der *Deformationsgradiententensor* \mathbf{F} sowie der *Verschiebungsgradiententensor* \mathbf{H} wie folgt definiert:

$$\mathbf{F} = \frac{\partial \mathbf{x}}{\partial \mathbf{X}} = \nabla_{\mathbf{x}\mathbf{x}} = \frac{\partial (\mathbf{u} + \mathbf{X})}{\partial \mathbf{X}} = \frac{\partial \mathbf{u}}{\partial \mathbf{X}} + \mathbf{I} = \mathbf{H} + \mathbf{I}. \quad (2.7)$$

Wie aus Gl. (2.7) ersichtlich ist, können \mathbf{F} und \mathbf{H} durch Addition bzw. Subtraktion des Einheitstensors ineinander überführt werden. Es ist daher ausreichend, im Folgenden ausschließlich den Deformationsgradiententensor als Verformungsmaß zu betrachten.

Bezeichnen $d\mathbf{L}$ und $d\mathbf{l}$ differentielle Linien-, $d\mathbf{A}$ und $d\mathbf{a}$ differentielle Flächen- und dV und $d\mathbf{v}$ differentielle Volumenelemente in der unverformten bzw. verformten Konfiguration, so lässt sich zeigen, dass diese Größen wie folgt miteinander korreliert sind:

$$d\mathbf{l} = \mathbf{F} \cdot d\mathbf{L}, \quad (2.8)$$

$$d\mathbf{a} = (\det \mathbf{F}) \mathbf{F}^{-T} \cdot d\mathbf{A} \quad \text{und} \quad (2.9)$$

$$d\mathbf{v} = (\det \mathbf{F}) dV. \quad (2.10)$$

Die differentielle Flächenelemente sind hierbei durch ihre Flächennormalen $d\mathbf{A}/|d\mathbf{A}|$ und ihren Flächeninhalt $|d\mathbf{A}|$ charakterisiert. Der Deformationsgradiententensor ist also ausreichend, um die Transformation von Linien-, Flächen- und Volumenelementen vollständig zu

beschreiben. Des Weiteren wird aus Gl. (2.10) deutlich, dass $\det \mathbf{F}$ stets positiv sein muss, da weder eine Volumenreduktion auf den Wert null noch ein negatives Volumen physikalisch sinnvoll wären².

Im Allgemeinen ist \mathbf{F} nicht symmetrisch. Es kann allerdings gezeigt werden, dass die nicht symmetrischen Anteile von \mathbf{X} stets auf Starrkörperrotationen zurückzuführen sind. So ergibt beispielsweise eine Rotation nach Gl. (2.6)

$$\mathbf{F} = \mathbf{I} + \omega_j \epsilon_{ijk} \mathbf{e}_k \mathbf{e}_i, \quad (2.11)$$

wobei der zweite Summand eindeutig antisymmetrisch ist.

Da, wie oben bereits erwähnt, Materialmodelle nicht von Starrkörperrotationen abhängen dürfen, ist es sinnvoll, alternative Dehnungsmaße aus \mathbf{F} abzuleiten, welche keine Starrkörperrotation widerspiegeln. Eine Möglichkeit hierzu ist die *polare Zerlegung* des Deformationsgradiententensors. Nach dem Zerlegungssatz für Tensoren lässt sich jeder Tensor \mathbf{T} mit $\det \mathbf{T} \neq 0$ wie folgt eindeutig in einen Rotationstensor \mathbf{R} und einen symmetrischen, positiv-definiten Tensor \mathbf{U} zerlegen:

$$\mathbf{T} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{U}. \quad (2.12)$$

Wie bereits erläutert, gilt für \mathbf{F} stets $\det \mathbf{F} > 0$, also auch

$$\mathbf{F} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{U}. \quad (2.13)$$

Für jeden Rotationstensor \mathbf{R} gilt hierbei $\mathbf{R} \cdot \mathbf{R}^T = \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R} = \mathbf{I}$ und $\det \mathbf{R} = 1$. Die Tensoren \mathbf{R} und \mathbf{U} lassen sich aus \mathbf{F} wie folgt berechnen:

- Berechne $\mathbf{C} = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}$. Es resultiert, dass $\mathbf{C} = \mathbf{C}^T$.
- Finde die Eigenwerte γ_i , $i = 1, 2, 3$, und zugehörigen Eigenvektoren \mathbf{c}_{γ_i} von \mathbf{C} .
- Berechne $\mu_i = \sqrt{\gamma_i}$.
- Dann gilt $\mathbf{U} = \sum_i \mu_i \mathbf{c}_{\gamma_i} \otimes \mathbf{c}_{\gamma_i}$ und $\mathbf{R} = \mathbf{F} \cdot \mathbf{U}^{-1}$.

Statt \mathbf{F} ließe sich nach einer solchen multiplikativen Zerlegung stets auch der so genannte *rechte Strecktensor* \mathbf{U} als Verformungsmaß verwenden, der die lokalen Starrkörperrotationen des Körpers nicht widerspiegelt. Aufgrund des geringeren Rechenaufwandes ist es aber üblich, direkt den oben bereits eingeführten *rechten Cauchy-Green-Tensor*

$$\mathbf{C} = \mathbf{U}^2 = \mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F} \quad (2.14)$$

zu verwenden.

Der besseren Übersichtlichkeit wegen ist es für die meisten Ingenieur Anwendungen üblich, Verformungsmaße zu verwenden, welche im unverformten Zustand in allen Komponenten

²Wird für die verformte Konfiguration ein Links-, für die unverformte hingegen ein Rechtssystem eingeführt, ergibt sich $\det \mathbf{F} < 0$; hier sollen die Betrachtungen aber auf Rechtssysteme beschränkt werden, sodass stets $\det \mathbf{F} > 0$ gelten muss. Siehe hierzu auch Truesdell (1985).

den Wert null annehmen. Ein solches Maß stellt der *Green-Lagrange'sche Verzerrungstensor*

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\mathbf{C} - \mathbf{I}) \quad (2.15)$$

dar. Setzt man in Gl. 2.15 die Definitionen für \mathbf{C} (2.14) und \mathbf{F} (2.7) in Abhängigkeit von den Verschiebungen ein, so erhält man

$$\mathbf{E} = \frac{1}{2} (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}} + (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}})). \quad (2.16)$$

Eine weiterführende Annahme ist die kleiner oder *infinitesimaler* Deformationen, welche besagt, dass sich die Verschiebungen benachbarter Materiepunkte nur wenig voneinander unterscheiden. Von dieser Annahme soll im Folgenden stets ausgegangen werden. Hieraus folgt, dass für die Ableitung der Verschiebung nach dem Ort $|\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}| \ll 1$ gilt. Ist aber $|\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}| \ll 1$, so gilt auch $(\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}) \cdot (\mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}}) \ll \nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u}$. Vereinfachend lässt sich daher der Green-Lagrange'sche Verzerrungstensor auch wie folgt annähern:

$$\mathbf{E} \approx \frac{1}{2} (\nabla_{\mathbf{x}} \mathbf{u} + \mathbf{u} \nabla_{\mathbf{x}}) =: \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (2.17)$$

Da in dieser Abschätzung quadratische Terme gegenüber linearen vernachlässigt wurden, spricht man bezüglich der Annahme infinitesimaler Deformationen auch von *geometrischer Linearisierung*. Der linearisierte Green-Lagrange'sche Dehnungstensor $\boldsymbol{\varepsilon}$ ist das in den Ingenieurwissenschaften wohl am häufigsten verwendete Dehnungsmaß und wird oft auch einfach als *Dehnungstensor* oder *Dehnung* bezeichnet.

Für infinitesimale Deformationen nehmen auch die Ortsableitungen in Euler'scher und Lagrange'scher Betrachtungsweise näherungsweise den gleichen Wert an. Auf die Unterscheidung zwischen beiden, wie zum Beispiel zuvor durch Indizierung des ∇ -Operators mit den entsprechenden Koordinaten, kann daher verzichtet werden.

Der Begriff der Dehnung wird in den Ingenieurwissenschaften häufig auch direkt als relative Längenänderung eingeführt, welche sich beispielsweise im klassischen Zugversuch³ leicht identifizieren lässt. Wie in Abb. 2.2 skizziert, sei l_0 die Messlänge an einer Probe im unverformten Zustand. Diese Länge gehe für den verformten Zustand in l über. Die Dehnung in Längsrichtung wird dann zu

$$\varepsilon_{11} = \frac{l - l_0}{l_0} = \frac{\Delta l}{l} \quad (2.18)$$

berechnet.

2.1.2. Konstitutive Gleichungen

Üblicher Weise werden diejenigen Gleichungen als *konstitutiv* bezeichnet, welche die das Materialverhalten beschreibenden Größen miteinander verknüpfen. Als derartige Größen

³Der Zugversuch als zentraler Standardversuch der mechanischen Werkstoffprüfung ist nach DIN EN 10002 genormt.

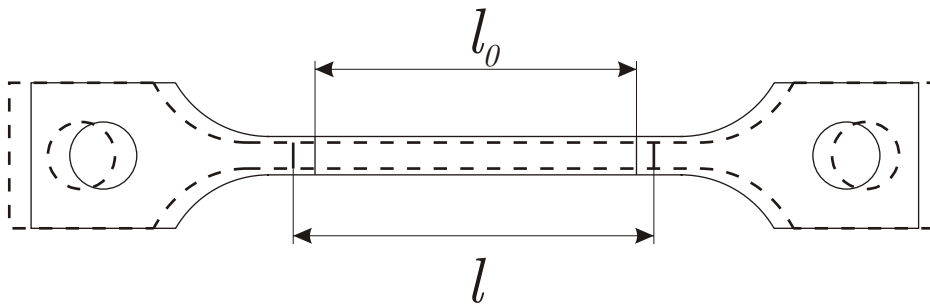


Abbildung 2.2.: Zugprobe mit gedehnter (l) und ursprünglicher (l_0) Länge.

wurden im vorherigen Abschnitt verschiedene Verformungsmaße eingeführt. Abhängig davon, welche Aspekte des Materialverhaltens erfasst werden sollen, können neben Verformungen unter anderem *Spannungen*, also auf bestimmte Flächen der verformten oder unverformten Konfiguration bezogene Kräfte, die Temperatur, aber auch energetische Größen in konstitutiven Gleichungen in Beziehung gesetzt werden. Für mikrostrukturelle Überlegungen bietet sich die Formulierung des Materialverhaltens in Abhängigkeit von energetischen Größen an.

Aus alltäglichen Beobachtungen ist bekannt, dass geringfügig verformte Festkörper danach streben, ihre ursprüngliche Form wieder einzunehmen. Hierbei hängt es stark vom jeweiligen Material ab, bis zu welcher Verformung das Materialverhalten noch in ausreichender Näherung *reversibel* ist, wie stark das entsprechende Material also vorübergehend verformt werden kann, ohne dass bleibende Formänderungen auftreten. Vollständig reversibles Materialverhalten wird im Rahmen der *Elastizitätslehre* behandelt; nicht-reversible Vorgänge betrachtet die *Plastizitätstheorie*. Die maximale elastische Verformung wird in der Materialwissenschaft als *Streckgrenze* bezeichnet.

Aus dem täglichen Leben ist bekannt, dass die meisten Körper einen für sie „typischen“ Zustand besitzen, oder, in anderen Worten, man verbindet mit den meisten Körpern genau eine konkrete Form. Ein solcher Zustand, der zuvor auch bereits als *unverformte Konfiguration* eingeführt wurde, wird auch als *Gleichgewichtslage*⁴ eines Körpers bezeichnet. Für die Gleichgewichtslagen wird davon ausgegangen, dass ein Körper sie ohne Einwirkung äußerer Lasten von selbst einnimmt.

Als Maß dafür, wie weit ein verformter Körper von seiner Gleichgewichtslage entfernt ist, wird die *Helmholtz'sche freie Energiedichte* eingeführt. Diese entspricht der *Arbeit*, die pro Volumeneinheit notwendig ist, um einen Körper in diesen Zustand zu versetzen. Verformte Körper nehmen in ihrem Inneren stets denjenigen Zustand ein, der ihre freie Energiedichte minimiert.

Für Materialien, die ein linear elastisches Materialverhalten aufweisen, wie zum Beispiel die meisten Metalle unterhalb ihrer Streckgrenze, wird diese Energiedichte wie folgt tensoriell formuliert:

$$\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}) = \frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (2.19)$$

⁴Konkreter handelt es sich bei den hier beschriebenen Zuständen um *lastfreie* Gleichgewichtslagen.

Hierbei ist \mathbb{C} der so genannte Elastizitätstensor, ein Tensor vierter Stufe, der im dreidimensionalen Raum $3^4 = 81$ Komponenten aufweist.

Der Gradient der Energie nach der Dehnung ist die so genannte *Ingenieursspannung*⁵

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \Psi(\boldsymbol{\varepsilon})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}}. \quad (2.20)$$

Im Falle der Energiefunktion nach Gl. (2.19) ergibt sich somit

$$\boldsymbol{\sigma} = \frac{\partial \left(\frac{1}{2} \boldsymbol{\varepsilon} : \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon} \right)}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} = \mathbb{C} : \boldsymbol{\varepsilon}. \quad (2.21)$$

Wie Standardwerken der Kontinuumsmechanik zu entnehmen ist, muss für die Spannung im Inneren des Körpers das (statische) Kräftegleichgewicht

$$\nabla \cdot \boldsymbol{\sigma} = -\mathbf{p} \quad (2.22)$$

gelten, wobei \mathbf{p} die Volumenkraftdichte bezeichnet. Diese kann zum Beispiel durch Gravitations- oder Magnetfelder erzeugt werden. Derartige Einflüsse können für die folgenden Herleitungen vernachlässigt werden, weswegen die Volumenkraftdichte im weiteren Verlauf dieser Arbeit zu null gesetzt wird.

Da die Komponenten des Elastizitätstensors \mathbb{C} das Materialverhalten ähnlicher Werkstoffe voneinander unterscheidet, können diese auch als Materialparameter bezeichnet werden. Die Anzahl unabhängiger Materialparameter hängt wiederum von der Symmetrie des Materialverhaltens ab:

- Im Allgemeinen Fall können zunächst alle 81 Parameter unabhängig sein.
- Durch Einführung des *Boltzmann-Axioms*, welches besagt, dass im Kontinuum keine Elementarmomente auftreten, ergibt sich die Symmetrie des Materialtensors. Da nach Gl. (2.17) auch der geometrisch lineare Dehnungstensor symmetrisch sein muss, ergeben sich folgende Symmetrien des Materialtensors:

$$\mathbb{C}_{ijkl} = \mathbb{C}_{jikl} = \mathbb{C}_{ijlk} = \mathbb{C}_{klij} \quad (2.23)$$

Somit bleiben 21 unabhängige Materialparameter.

Berücksichtigt man zusätzlich, dass sich bei einer Rotation von Spannungs-, Dehnungs- und Materialtensor durch einen beliebigen Rotationstensor das Materialverhalten nicht ändern darf, ergeben sich drei zusätzliche Abhängigkeiten und somit 18 verbleibende Kennwerte.

- Weist das Materialverhalten eine Symmetrieebene auf, verringert sich die Anzahl der unabhängigen Parameter um sechs auf 12. Man spricht in diesem Falle von *monotropem* Materialverhalten.

Hierbei ergibt die Einführung der Symmetrie zunächst acht neue Abhängigkeiten der Kennwerte, wobei aber auch zwei der drei oben aus der Rotationsunabhängigkeit der Materialgleichung abgeleiteten Beziehungen identisch erfüllt werden.

⁵Wie zuvor für Dehnungsmaße gezeigt, lassen sich auch für Spannungsmaße eine Vielzahl verschiedener Formulierungen herleiten. Da im Rahmen dieser Arbeit lediglich die Ingenieursspannung Verwendung findet, wird darauf hier jedoch verzichtet.

- Liegen zwei Symmetrieebenen vor (*Orthotropie*), bleiben nur noch neun unbekannte Parameter zu bestimmen. Eine darüber hinaus gehende Erweiterung auf drei Symmetrieebenen verringert die Anzahl der unbekannt Parameter nicht.
- Bei gänzlich richtungsunabhängigem (*isotropen*) Materialverhalten lässt sich der Elastizitätstensor durch zwei Parameter vollständig beschreiben.

Für die Wahl zweier Parameter, die das Verhalten isotroper Materialien beschreiben, gibt es verschiedene Möglichkeiten, die bekanntesten sind hierbei:

- *Elastizitätsmodul* (auch *E-Modul*) E und *Querkontraktionszahl* ν . Diese Kombination von Parametern hat den Vorteil, dass sie leicht mit dem einachsigen Zugversuch in Verbindung zu setzen sind: der Elastizitätsmodul gibt hierbei den Proportionalitätsfaktor zwischen einachsiger Spannung und gleich gerichteter Dehnung

$$E = \frac{\sigma_{11}}{\varepsilon_{11}} \quad (\text{für einachsigen Zug in 1-Richtung}) \quad (2.24)$$

an, während die Querkontraktionszahl zum Beispiel bei runden Proben das Verhältnis von Durchmesser- zu Längenänderung

$$\nu = \frac{\varepsilon_{22}}{\varepsilon_{11}} \quad (\text{für einachsigen Zug in 1-Richtung}) \quad (2.25)$$

beschreibt.

- *Lamé-Konstanten* λ und μ . Die Wahl der Lamé-Konstanten zur Beschreibung des Materialverhaltens bietet sich an, da hiermit der Elastizitätstensor besonders einfach formuliert werden kann:

$$\mathbb{C}_{ijkl} = \lambda \delta_{ij} \delta_{kl} + 2\mu \delta_{ik} \delta_{jl}. \quad (2.26)$$

Die Lamé-Konstanten lassen sich wie folgt aus E-Modul und Querkontraktionszahl bestimmen:

$$\mu = \frac{E}{2(1+\nu)} \quad \text{und} \quad \lambda = \frac{\nu E}{(1+\nu)(1-2\nu)}. \quad (2.27)$$

2.2. Einführung in die Kristallographie

Mit dem Aufbau und den Eigenschaften kristalliner Materialien, zu denen auch alle Metalle gehören, beschäftigt sich die Kristallographie. Im Folgenden sollen die dieser Wissenschaft zuzuordneten Begriffe eingeführt und erläutert werden, die für diese Arbeit relevant sind. Umfassendere Darstellungen dieses Fachgebietes finden sich unter anderem in einführender Literatur zur Kristallographie wie Borchardt-Ott (1987), Buerger (1977) und Kleber et al. (1998) sowie in Standardwerken der Werkstoffwissenschaften wie Hornbogen (2006) oder Schatt and Worch (2003). Eine ausführliche Darstellung der für Formgedächtnismaterialien relevanten Transformationsmechanismen findet sich auch in Otsuka and Wayman (1999) und Bhattacharya (2003).

Unter einem *Kristall* versteht man einen *Festkörper* mit regelmäßiger räumlicher Anordnung seiner Atome. Ein Festkörper zeichnet sich hierbei dadurch aus, dass seine Atome ihre Position im Körper in der Regel nicht verändern. Da die Regelmäßigkeit der Atomanordnung von weitaus höherer Größenordnung ist als beispielsweise der Abstand zweier benachbarter Atome zueinander, wird diese auch als *Fernordnung* bezeichnet. Die von den Atommittelpunkten angenommenen Positionen bilden das so genannte *Kristallgitter*.

Um sich dem Aufbau kristalliner Strukturen systematisch zu nähern, ist es sinnvoll, zunächst eine einzelne Ebene des Kristallgitters zu betrachten. Derartige Ebenen heißen *Netzebenen*. Eine einfache allgemeine Netzebene ist in Abb. 2.3 abgebildet, wobei die Kreise für Atome stehen. Hierbei werden zur Beschreibung der Kristallgeometrie Achsen x und z in diejenigen Richtungen gelegt, in denen die meisten Atome pro Längenrichtung zu finden sind. Die Wahl des Atoms, in welches das Koordinatensystem gelegt wird, ist hierbei willkürlich. Parallel zu der x - und z -Achse werden Vektoren a und c eingeführt, welche die relative Lage benachbarter Atome zueinander beschreiben. Die Vektoren a und c werden im Folgenden *Kantenvektoren* genannt⁶. Der von beiden Vektoren eingeschlossene Winkel wird mit β bezeichnet. Im Allgemeinen besteht weder zwischen der Länge der Vektoren a und c eine feste Beziehung, noch muss β bestimmte Werte einnehmen. Das von a und c aufgespannte Parallelogramm wird *Elementarmasche* genannt.

Da Kristalle dreidimensionale Strukturen sind, bestehen sie aus einer sehr großen Anzahl von Netzebenen. Eine Möglichkeit, sich die räumliche Struktur von Kristallen zu verdeutlichen besteht in deren Beschreibung als eine Aufeinanderschichtung von parallelen Netzebenen. Da aufgrund der Periodizität der Kristalle parallele Netzebenen die gleiche Struktur haben müssen, spricht man auch von *Netzebenen*scharen. Die Anordnung der Ebenen über- und untereinander wird durch Einführung einer dritten Koordinate y sowie eines dritten Kantenvektors b beschrieben, wie in Abb. 2.4 dargestellt. Die Orientierung des neu eingeführten Vektors wird so gewählt, dass a , b und c ein Rechtssystem bilden. Die Winkel zwischen a bzw. c und b werden mit γ bzw. α bezeichnet. Das von a , b und c aufgespannte Parallelepiped⁷ bildet die *Elementarzelle* einer kristallinen Struktur, welche in der Skizze durch gestrichelte Linien dargestellt ist.

Abhängig von der genauen Geometrie der Elementarzelle unterscheidet man zwischen ver-

⁶In der Literatur wird häufig auch ein x - y -Koordinatensystem mit Kantenvektoren a und b verwendet. Das hier gewählte Koordinatensystem dient der besseren Anschaulichkeit der folgenden Skizzen.

⁷Unter einem *Parallelepiped* oder *Spat* versteht man in der Geometrie einen von sechs ebenen, parallel angeordneten Flächen begrenzten Körper.

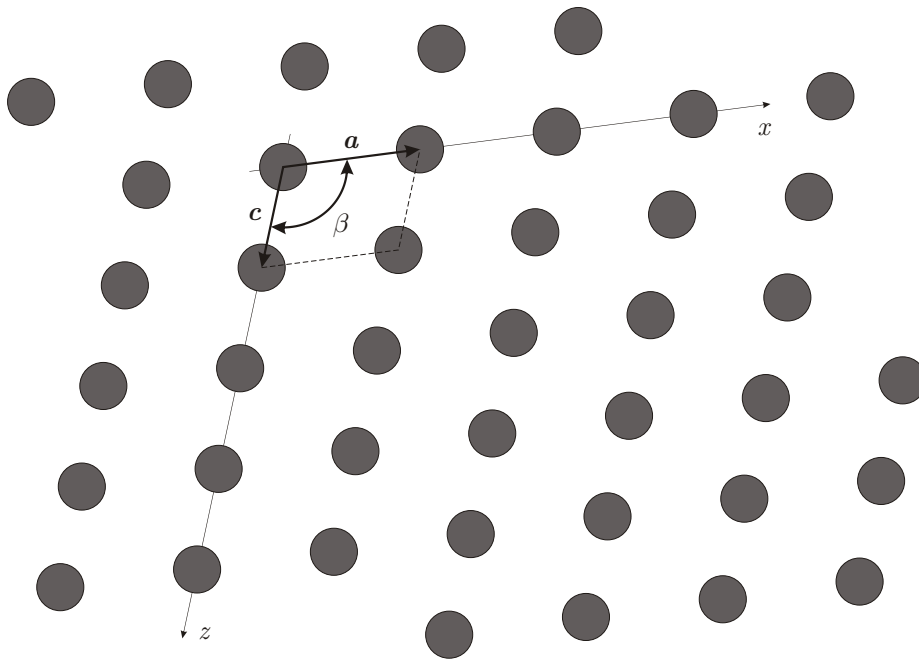


Abbildung 2.3.: Allgemeine Netzebene mit x - z -Koordinatensystem.

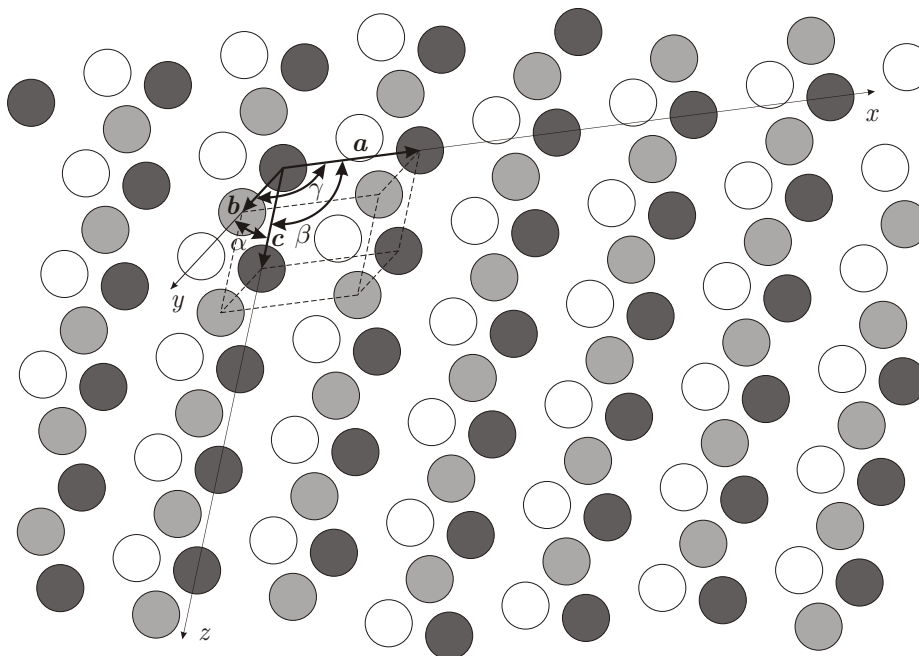


Abbildung 2.4.: Allgemeine Netzebenenchar mit x - y - z -Koordinatensystem. Die Netzebenen sind in der Reihenfolge dunkelgrau - hellgrau - weiß von unten nach oben angeordnet.

schiedenen so genannten *Kristallsystemen*:

- *triklin*: das allgemeinste Kristallsystem mit ungleichen Kantenlängen und nicht rechten Eckwinkeln der Elementarzelle.
- *monoklin*: hierbei sind zwei der Eckwinkel 90° -Winkel, wobei die Kantenlängen unterschiedlich bleiben.
- *orthorhombisch*: bei weiterhin ungleichen Kantenlängen schließen alle Kanten rechte Winkel ein.
- *tetragonal*: zwei Kantenlängen sind gleich, alle Winkel messen 90° .
- *kubisch*: alle Kanten sind gleich lang und schließen 90° -Winkel ein.
- *rhomboedrisch*.⁸ alle Kantenlängen sind gleich, die eingeschlossenen Winkel sind zwar untereinander gleich groß, aber keine rechten Winkel.
- *hexagonal*: zwei gleich lange Kanten schließen einen 120° -Winkel ein, die beiden anderen Winkel messen 90° .

Diese *primitiven*, also pro Elementarzelle nur ein Atom enthaltenden⁹, Kristallsysteme sind in Tab. 2.1 auf S. 16 dargestellt. Zusätzlich zu den Eckatomen können Elementarzellen noch weitere Atome enthalten. Die Anordnung dieser Atome in der Elementarzelle wird durch die so genannte *Basis*

$$\mathbf{r} = x\mathbf{a} + y\mathbf{b} + z\mathbf{c}, \quad 0 \leq x, y, z < 1 \quad (2.28)$$

mit Hilfe der Kantenvektoren beschrieben. In Formgedächtnislegierungen spielen besonders *raumzentrierte* mit einem zusätzlichen Atom in der Zellenmitte ($\{x, y, z\} = \{1/2, 1/2, 1/2\}$) und *allseitig flächenzentrierte* Elementarzellen mit einem zusätzlichen Atom in der Mitte jeder Begrenzungsfläche ($\{x, y, z\} = \{0, 1/2, 1/2\}$, $\{1, 1/2, 1/2\}$ und deren Permutationen) eine Rolle.

Für die in dieser Arbeit betrachteten Formgedächtniswerkstoffe sind Transformationen von der kubischen *Austenit*phase in tetragonalen, orthorhombischen oder monoklinen *Martensit* von besonderer Wichtigkeit. Im Folgenden soll daher eine kurze Übersicht über diese drei martensitischen Transformationen gegeben werden. Eine ausführlichere Beschreibung dieser Mechanismen in anderer Notation ist in Bhattacharya (2003) zu finden.

Der geometrisch einfachste der drei genannten Transformationsmechanismen ist die Umwandlung vom kubischen Austenit zum tetragonalen Martensit. Beispiele dieses Materialverhaltens stellen unter anderem die von Guttman (1950) und Enami and Nenno (1971) beschriebenen Legierungen InTl und NiAl dar. Die Transformation der Einheitszelle ist in Abb. 2.5 skizziert. Wie in der Abbildung gezeigt, verkleinert sich die von den Kantenvektoren \mathbf{a} und \mathbf{c} aufgespannte quadratische Grundfläche gleichmäßig bei gleichzeitiger Verlängerung des dritten Kantenvektors.

⁸Die rhomboedrische Kristallstruktur geht durch die Definition einer alternativen Elementarzelle in eine *trigonale* Struktur über.

⁹Da in jeder Ecke acht Elementarzellen aneinanderstoßen, sind die acht Eckatome jeweils nur zu einem Achtel zu zählen.

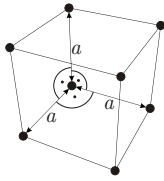
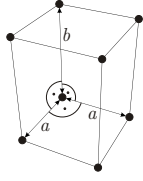
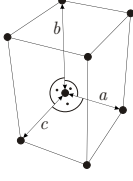
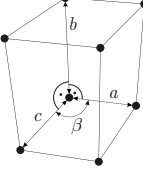
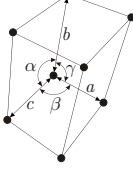
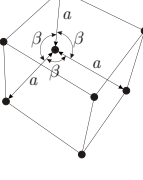
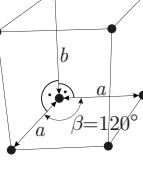
Kristallsystem	Längen	Winkel	Skizze
kubisch	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
tetragonal	$a = c \neq b$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
orthorhombisch	$a \neq b \neq c \neq a$	$\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$	
monoklin	$a \neq b \neq c \neq a$	$\alpha = \gamma = 90^\circ \neq \beta$	
triklin	$a \neq b \neq c \neq a$	$\alpha \neq \beta \neq \gamma \neq \alpha$ $\alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ$	
rhomboedrisch	$a = b = c$	$\alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ$	
hexagonal	$a = c \neq b$	$\alpha = \gamma = 90^\circ$ $\beta = 120^\circ$	

Tabelle 2.1.: Die sieben primitiven Kristallsysteme.

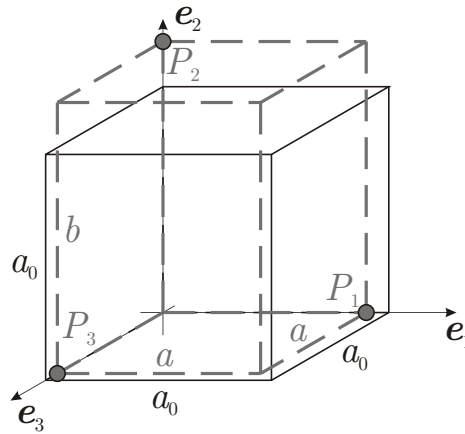


Abbildung 2.5.: Transformation von kubischem Austenit (schwarz) zu tetragonalem Martensit (grau, gestrichelt).

Sind der eine Transformation kennzeichnende Anfangs- und Endzustand bekannt, so lässt sich daraus der zugehörige Dehnungstensor, auch als *Transformationsdehnung* oder *Bain-Dehnung* bezeichnet, bestimmen. Im Sonderfall eines kubischen Ausgangszustandes lässt sich der entsprechende Deformationsgradiententensor wie folgt direkt ermitteln:

$$\mathbf{F} = \frac{1}{a_0} (\mathbf{x}_1^m; \mathbf{x}_2^m; \mathbf{x}_3^m), \quad (2.29)$$

wobei a_0 für die Kantenlänge der Ausgangselementarzelle steht. Die Spaltenvektoren \mathbf{x}_i^m lassen sich wie folgt aus der Skizze ablesen: es handelt sich hierbei um die Positionen derjenigen Eckatome (im Ausgangskordinatensystem), welche sich vor der Transformation an den Punkten \mathbf{X}_i befunden haben. In Abb. 2.5 sind dies die Atome an den mit P_1 , P_2 und P_3 gekennzeichneten Positionen.

Für die kubisch-tetragonale Transformation ergibt sich somit der Deformationsgradiententensor

$$\mathbf{F} = \frac{1}{a_0} \begin{pmatrix} a & 0 & 0 \\ 0 & b & 0 \\ 0 & 0 & a \end{pmatrix}, \quad (2.30)$$

aus dem sich die zugehörige Transformationsdehnung $\boldsymbol{\eta}$ ¹⁰ wie folgt berechnen lässt:

$$\boldsymbol{\eta} = \frac{1}{2} (\mathbf{F} - \mathbf{I} + (\mathbf{F} - \mathbf{I})^T) = \begin{pmatrix} \frac{a}{a_0} - 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{b}{a_0} - 1 & 0 \\ 0 & 0 & \frac{c}{a_0} - 1 \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \bar{\alpha} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{\beta} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\alpha} \end{pmatrix}. \quad (2.31)$$

Hierbei wurde die Definition des Deformationsgradiententensors (2.7) in die des Dehnungstensors (2.17) eingesetzt. Die Dehnungsparameter zwischen Austenit und Martensit werden mit griechischen Kleinbuchstaben gekennzeichnet und durch einen Überstrich von den Winkeln der Elementarzelle unterschieden.

Die Wahl der vertikalen Würfelkante in Abb. 2.5 als diejenige, welche bei der Transformation verlängert wird, ist willkürlich. Alternativ könnten auch die horizontale oder die aus der

¹⁰Im Folgenden wird zwecks besserer Unterscheidbarkeit ε weiterhin für allgemeine Dehnungstensoren und $\boldsymbol{\eta}$ für Transformationsdehnungstensoren verwendet.

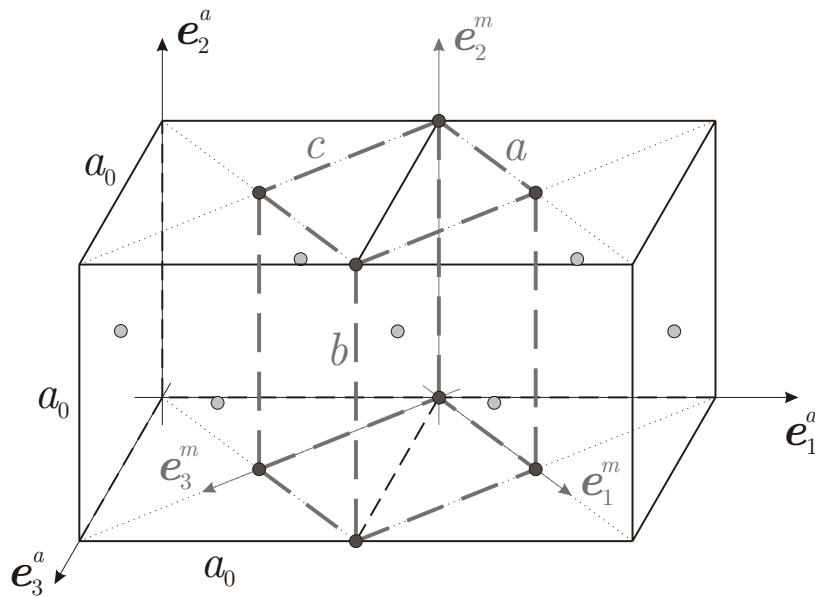


Abbildung 2.6.: Transformation von kubischem Austenit (schwarz) zu orthorhombischem Martensit (grau, gestrichelt).

Zeichenebene heraus zeigende Kante gedehnt werden. Je nach Wahl der längeren Martensitelementarzellenkante spricht man von verschiedenen *Varianten* des Martensits. Verschiedene Varianten eines Kristallsystems können stets durch einfache Symmetriebeziehungen ineinander überführt werden. Im Falle des tetragonalen Martensits wäre dies beispielsweise eine 90° -Drehung um eine der kürzeren Kanten.

In der Literatur unterscheidet sich die Art und Weise, in der die Anzahl der Varianten eines phasentransformierenden Materials gezählt wird: häufig sind mit „Varianten“ lediglich die martensitischen gemeint, während zum Teil auch der Austenit als kristalline Variante desselben Werkstoffs mitgezählt wird. Im Rahmen dieser Arbeit wird letztere Zählweise verwendet.

Als nächstes wird die Transformation vom kubischen Austenit zu orthorhombischen Martensit erläutert, wie sie unter anderem in CuAlNi Duggin and Rachinger (1964) und AuCd Chang and Read (1951), dem zuerst entdeckten Formgedächtniswerkstoff, zu beobachten ist. Bei dieser Transformation könnte man zunächst an einen sehr ähnlichen Mechanismus wie bei der zuvor betrachteten Umwandlung zu tetragonalem Martensit denken, nur dass sich die Kantenlängen a und b nicht gleichmäßig verändern.

Bei der in Formgedächtniswerkstoffen stattfindenden kubisch-orthorhombischen Transformation entsteht die orthorhombische Elementarzelle allerdings etwas anders, wie Abb. 2.6 verdeutlicht: aus den vier Eck- und vier flächenzentrierten Atomen der kubisch-flächenzentrierten Austenitzelle, welche in der Skizze dunkelgrau dargestellt sind, entsteht durch ungleichmäßige Dehnung in drei orthogonale Richtungen der orthorhombische Martensit. Die drei Hauptrichtungen der Dehnung fallen mit den Kanten des Martensit-Koordinatensystems zusammen, welches in der Abbildung mit e_i^m bezeichnet ist.

Das Martensit-Koordinatensystem kann in Koordinaten des Ausgangssystems zu

$$\mathbf{e}_1^m = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_2^m = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_3^m = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.32)$$

angegeben werden. Nach der Transformation befinden sich die nach Gleichung (2.29) anzugebenden Ecken der Austenitelementarzelle an folgenden Positionen:

$$\mathbf{x}_1 = a\mathbf{e}_1^m - c\mathbf{e}_3^m = \begin{pmatrix} \frac{a+c}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{a-c}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad (2.33)$$

$$\mathbf{x}_2 = b\mathbf{e}_2^m = \begin{pmatrix} 0 \\ b \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (2.34)$$

$$\mathbf{x}_3 = a\mathbf{e}_1^m + c\mathbf{e}_3^m = \begin{pmatrix} \frac{a-c}{\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{a+c}{\sqrt{2}} \end{pmatrix}. \quad (2.35)$$

Damit ergibt sich der Deformationsgradiententensor der kubisch-orthorhombischen Transformation in Formgedächtniswerkstoffen

$$\mathbf{F} = \frac{1}{a_0} \begin{pmatrix} \frac{a+c}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{a-c}{\sqrt{2}} \\ 0 & b & 0 \\ \frac{a-c}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{a+c}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

sowie die zugehörige Transformationsdehnung

$$\boldsymbol{\eta} = \frac{1}{a_0} \begin{pmatrix} \frac{a+c}{\sqrt{2}} - 1 & 0 & \frac{a-c}{\sqrt{2}} \\ 0 & b - 1 & 0 \\ \frac{a-c}{\sqrt{2}} & 0 & \frac{a+c}{\sqrt{2}} - 1 \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \frac{\bar{\alpha} + \bar{\gamma}}{2} & 0 & \frac{\bar{\alpha} - \bar{\gamma}}{2} \\ 0 & \bar{\beta} & 0 \\ \frac{\bar{\alpha} - \bar{\gamma}}{2} & 0 & \frac{\bar{\alpha} + \bar{\gamma}}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.37)$$

Die hierbei eingeführten Parameter sind wie folgt definiert:

$$\bar{\alpha} = \frac{\sqrt{2}a - a_0}{2a_0}, \quad \bar{\beta} = \frac{b - a_0}{a_0} \quad \text{und} \quad \bar{\gamma} = \frac{\sqrt{2}c - a_0}{2a_0}. \quad (2.38)$$

Bei der Umwandlung von kubischem Austenit zu orthorhombischem Martensit ist zunächst die Wahl derjenigen Ebene, in welcher die „Grundfläche“ der Martensitzelle liegt, willkürlich. Die drei gleichwertigen Alternativen sind die von \mathbf{e}_1^m und \mathbf{e}_2^m , von \mathbf{e}_2^m und \mathbf{e}_3^m , sowie von \mathbf{e}_3^m und \mathbf{e}_1^m aufgespannten Ebenen.

Ist die Grundfläche gewählt, gibt es zusätzlich zwei ebenfalls gleichbedeutende Möglichkeiten, welche der in dieser Ebene liegenden Kanten der Martensitzelle stärker gedehnt werden soll. Damit ergeben sich sechs symmetrieverwandte Varianten des orthorhombischen Martensits. Kubisch zu orthorhombisch transformierende Materialien weisen also insgesamt sieben Varianten auf.

Der dritte Transformationstyp, der im Rahmen dieser Einleitung erläutert werden soll, ist der von kubischem Austenit zu monoklinem Martensit. Diese Umwandlung wird in NiTi

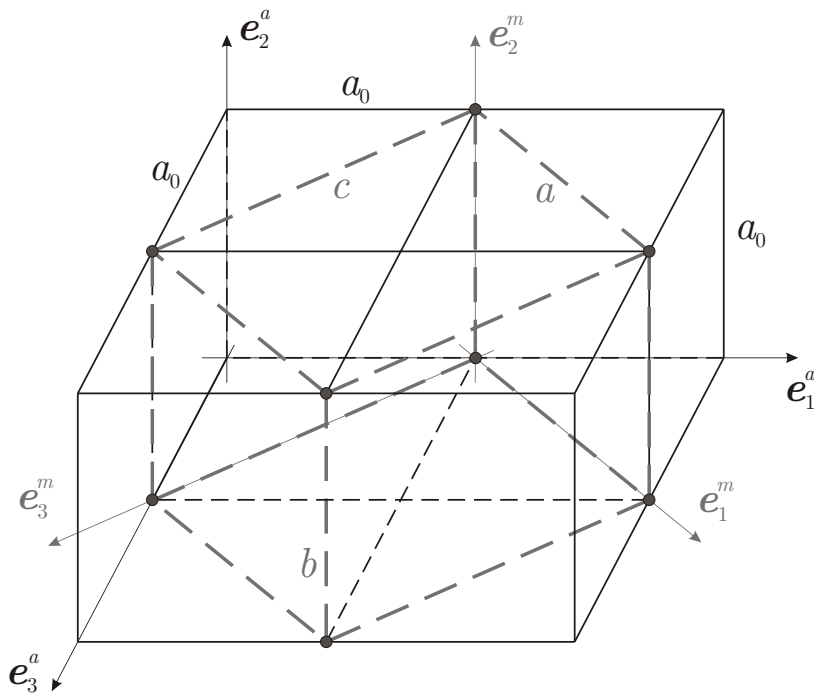


Abbildung 2.7.: Transformation von kubischem Austenit (schwarz) zu monoklinem Martensit (grau, gestrichelt).

Knowles and Smith (1981) und CuZr Seo and Schryvers (1998) beobachtet und ist in Abb. 2.7 schematisch dargestellt. Wie dort ersichtlich ist, entsteht auch bei dieser Transformation die Martensitzelle aus Teilen mehrerer benachbarter Austenitzellen, wobei aus vier Kanten und acht Flächendiagonalen der ursprünglichen Elementarzelle die Kanten der neuen Zelle entstehen.

Die monokline Struktur entsteht dann durch ungleichmäßige Dehnung entlang der mit e_i^m gekennzeichneten Achsen des Martensits und geringfügige relative Verschiebung der oberen und unteren Netzebene. Diese Relativverschiebung entspricht einer Drehung der e_2^m - um die e_3^m -Achse, wodurch der von e_1^m und e_2^m eingeschlossene Winkel γ im Martensitsystem von 90° abweicht.

Durch die Änderung von γ in einen nicht-rechten Winkel besteht nur noch bezüglich einer Achse, nämlich bezüglich der in Abb. 2.7 mit e_3^m zusammenfallenden Flächendiagonalen des Austenitsystems, Rotationssymmetrie. Man spricht bei dieser Transformation auch vom Typ *monoklin-I*. In einigen Legierungen wird hingegen eine Kante der Austenit-Elementarzelle durch die Transformation zur einzigen Symmetrieachse. Dieser Fall wird als *monoklin-II* bezeichnet und findet in Kupferbasislegierungen wie CuZn und CuAlNi statt, siehe auch Hornbogen and Wassermann (1956) bzw. Tokonami et al. (1979).

Dem entsprechend ergeben sich die Einheitsvektoren im monoklinen System zu

$$\mathbf{e}_1^m = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_2^m = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} \cos \gamma \\ \sqrt{2} \sin \gamma \\ \cos \gamma \end{pmatrix}, \quad \mathbf{e}_3^m = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} -1 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (2.39)$$

Mit den Eckkoordinaten

$$\mathbf{x}_1 = \frac{1}{2} (a\mathbf{e}_1^m - c\mathbf{e}_3^m) = \begin{pmatrix} \frac{a+c}{2\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{a-c}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix}, \quad (2.40)$$

$$\mathbf{x}_2 = b\mathbf{e}_2^m = \frac{\sqrt{2}}{2} \begin{pmatrix} b \cos \gamma \\ \sqrt{2} b \sin \gamma \\ b \cos \gamma \end{pmatrix}, \quad (2.41)$$

$$\mathbf{x}_3 = \frac{1}{2} (a\mathbf{e}_1^m + c\mathbf{e}_3^m) = \begin{pmatrix} \frac{a-c}{2\sqrt{2}} \\ 0 \\ \frac{a+c}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (2.42)$$

erhält man den Deformationsgradiententensor

$$\mathbf{F} = \frac{1}{a_0} \begin{pmatrix} \frac{a+c}{2\sqrt{2}} & \frac{\sqrt{2}}{2} b \cos \gamma & \frac{a-c}{2\sqrt{2}} \\ 0 & b \sin \gamma & 0 \\ \frac{a-c}{2\sqrt{2}} & \frac{\sqrt{2}}{2} b \cos \gamma & \frac{a+c}{2\sqrt{2}} \end{pmatrix} \quad (2.43)$$

und daraus schließlich die Transformationsdehnung von kubischem Austenit zu monoklinem Martensit

$$\boldsymbol{\eta} = \frac{1}{a_0} \begin{pmatrix} \frac{a+c}{2\sqrt{2}} - 1 & \frac{b \cos \gamma}{2\sqrt{2}} & \frac{a-c}{2\sqrt{2}} \\ \frac{b \cos \gamma}{2\sqrt{2}} & b \sin \gamma - 1 & \frac{b \cos \gamma}{2\sqrt{2}} \\ \frac{a-c}{2\sqrt{2}} & \frac{b \cos \gamma}{2\sqrt{2}} & \frac{a+c}{2\sqrt{2}} - 1 \end{pmatrix} =: \begin{pmatrix} \frac{\bar{\alpha} + \bar{\gamma}}{2} & \bar{\epsilon} & \frac{\bar{\alpha} - \bar{\gamma}}{2} \\ \bar{\epsilon} & \bar{\beta} & \bar{\epsilon} \\ \frac{\bar{\alpha} - \bar{\gamma}}{2} & \bar{\epsilon} & \frac{\bar{\alpha} + \bar{\gamma}}{2} \end{pmatrix}. \quad (2.44)$$

Die hier verwendeten Abkürzungen sind wie folgt definiert:

$$\bar{\alpha} = \frac{\sqrt{2} a - 2a_0}{4a_0}, \quad \bar{\beta} = \frac{b \sin \gamma - a_0}{a_0}, \quad \bar{\gamma} = \frac{\sqrt{2} c - 2a_0}{2a_0} \quad \text{und} \quad \bar{\epsilon} = \frac{b \cos \gamma}{2\sqrt{2} a_0}. \quad (2.45)$$

Für jede der im Falle des orthorhombischen Martensits bereits erläuterten sechs Varianten gibt es im monoklinen Martensit noch zwei gleichwertige Möglichkeiten, die sich bezüglich der Drehrichtung der \mathbf{e}_2^m - um die \mathbf{e}_3^m -Achse unterscheiden. Dadurch ergeben sich zwölf Martensitvarianten im monoklinen Fall.

3. Elastische Energie monokristalliner Formgedächtnismaterialien

Durch die Aufbringung äußerer Lasten findet in belasteten Körpern eine Formänderung statt. Hierbei wird, wie in Kapitel 2.1.2 schon erwähnt, grundlegend angenommen, dass sich diejenige Deformation $\boldsymbol{\varepsilon}$ einstellt, welche die elastische Energie $\Psi(\boldsymbol{\varepsilon})$ minimiert. Das Besondere an Formgedächtnislegierungen ist hierbei, dass sie eine solche Deformation nicht nur durch Verzerrung ihres Kristallgitters erreichen können, sondern auch, indem sie spontan von einer Kristallstruktur in eine andere transformieren.

Von der neuen Kristallstruktur ausgehend ist dann eine geringere Gitterverzerrung und damit in geeigneten Temperaturbereichen auch eine geringere Energie notwendig, um die aufgebrachte Formänderung zu erreichen. Für eine gegebene Last stellt sich dann diejenige kristallographische Variante ein, welche die minimale Energie liefert:

$$\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}) = \min_{i=0, \dots, n} [\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{i}_i)], \quad (3.1)$$

wobei i über die $n + 1$ Austenit- und Martensitvarianten läuft und \mathbf{i}_i die Einheitsvektoren im $n + 1$ -dimensionalen Raum sind. In der weiteren Modellierung wird für jede der Varianten ein linear elastisches Materialgesetz angenommen:

$$\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{i}_i) = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\eta}_i) : \mathbb{C}_i : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\eta}_i) + \alpha_i. \quad (3.2)$$

Die Abhängigkeit der Energiedichte vom Einheitsvektor \mathbf{i}_i – also davon, welche Variante jeweils betrachtet wird – äußert sich hierbei zunächst in der Auswahl der Transformationsdehnung $\boldsymbol{\eta}_i$. Die im Vergleich zu Gl. (2.19) modifizierte Formulierung von Ψ stellt sicher, dass das Energieminimum einer jeden Variante derart „verschoben“ wird, dass es der geänderten kristallinen Struktur im Material entspricht, welche sich durch die Transformation von Austenit zu einer der martensitischen Varianten ergibt.

Die chemische Energie α_i unterscheidet sich lediglich zwischen Austenit und Martensit, jedoch nicht zwischen den einzelnen Martensitvarianten, die sich durch Symmetrioperationen ineinander überführen lassen. Im Allgemeinen kann der Materialtensor \mathbb{C}_i ebenfalls für jede Variante ein anderer sein. In diesem Kapitel soll von für alle Varianten identischen Materialkennwerten ($\mathbb{C}_i = \mathbb{C} \forall i$) ausgegangen werden. Eine Erweiterung der Betrachtungen auf variantenspezifische Materialtensoren wird dann in Kapitel 4 vorgenommen.

Die Formulierung in Gl. (3.1) geht zunächst davon aus, dass an jedem Punkt im Material stets genau eine Variante zu finden ist. Ein häufig beobachtetes Phänomen bei martensitischen Transformationen ist jedoch die Bildung so genannter Mikrostrukturen. In derartigen Gefügeanordnungen bilden sich die Varianten in engem Wechsel und oft im Abstand einiger Nanometer aus. Die Beschreibung eines jeden Punktes im Material unter Zuordnung der dort vorliegenden Variante ist somit weder realisierbar noch sinnvoll: zum Einen würde der numerische Aufwand bei der Simulation in derartig feiner Auflösung ins Unermessliche

steigen, zum Anderen machen Fehlstellen, wie sie in jedem tatsächlichen Material vorkommen, eine realistische Modellierung auf einer derart feinen Skale unmöglich.

Um die Problematik einer zu feinskaligen Betrachtung zu vermeiden, werden Materialmodelle mit einer geringeren Auflösung aufgestellt, welche als unabhängige Variable von den mittleren Volumenfraktionen \mathbf{c} in einem so genannten *repräsentativen Volumenelement* (RVE) $\Omega = (0, 1)^d \subset \mathbb{R}^d$ abhängen. Hierbei ist d die Dimension des jeweiligen Problems. Zusätzlich ist zu beachten, dass verschiedene Punkte in einem solchen RVE unterschiedliche Verschiebungen aufweisen können. Dies wird beim Aufstellen der Energiedichte durch Einführung eines vom Ort \mathbf{y} abhängigen Verschiebungsfeldes φ berücksichtigt, dessen symmetrisierter Gradient zur gegebenen Dehnung ε hinzuaddiert wird.

Durch Mittelung der Energie über das RVE ergibt sich die quasikonvexifizierte Energiedichte. Vom mathematischen Standpunkt her ist Quasikonvexität eine notwendige Eigenschaft für die Existenz eines Minimums der elastischen Energie, wie in Anhang A näher erläutert. Für feste Volumenfraktionen ist

$$Q\Psi(\varepsilon, \mathbf{c}) = \inf \left\{ \int_{\Omega} \Psi(\varepsilon + \nabla^s \varphi(\mathbf{y}), \chi(\mathbf{y})) \, d\mathbf{y} \right. \\ \left. \varphi \in W_{\text{per}}^{1,2}(\Omega), \chi(\mathbf{y}) \in \mathcal{P}_{\text{pure}}^{n+1}, \int_{\Omega} \chi(\mathbf{y}) \, d\mathbf{y} = \mathbf{c} \right\}, \quad (3.3)$$

die *quasikonvexe Hülle* der Energiedichte (3.1), welche als minimale Energie pro Volumeneinheit definiert ist. Die Minimierung ist hierbei über alle möglichen Mikrostrukturen und Verschiebungsfeldfluktuationen durchzuführen. Die Mikrostrukturen gehen über den ‘‘Schaltvektor’’ $\chi(\mathbf{y})$ in die Gleichung ein. Dieser liegt in der Menge aller reinen Varianten

$$\mathcal{P}_{\text{pure}}^{n+1} = \{\mathbf{i}_0, \mathbf{i}_1, \dots, \mathbf{i}_n\} = \{(1, 0, \dots, 0)^T, (0, 1, \dots, 0)^T, \dots, (0, \dots, 0, 1)^T\} \quad (3.4)$$

und gibt an, welche Variante sich an welcher Stelle \mathbf{y} im RVE befindet. Die Integration von χ über Ω muss daher den Vektor der mittleren Volumenfraktionen \mathbf{c} ergeben. Da es sich bei φ um ein Fluktuationfeld handelt, muss dieses im Mittel den Wert null besitzen.

In Gl. (3.3) wurde zunächst von bekannten Volumenfraktionen ausgegangen. Eine vollständige Relaxierung des Problems berücksichtigt zusätzlich, dass sich auch die Volumenfraktionen unter Belastung so einstellen, dass daraus die geringstmögliche Energiedichte resultiert, also:

$$Q\Psi(\varepsilon) = \min_{\mathbf{c}} Q\Psi(\varepsilon, \mathbf{c}) \quad \text{u.d.N.} \quad \sum_{i=0}^n c_i = 1 \wedge c_i \geq 0, i = 0, \dots, n. \quad (3.5)$$

Die hier aufgeführten Nebenbedingungen stellen die Massenerhaltung sicher und schließen negative Volumenanteil aus.

Die in Gl. (3.3) eingeführte Energiedichte kann durch Ausmultiplizieren zu

$$Q\Psi(\varepsilon, \mathbf{c}) = \sum_{i=0}^n [c_i \Psi(\varepsilon, \mathbf{i}_i)] + \psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}) \quad (3.6)$$

vereinfacht werden. Hierbei steht der zweite Summand, der lediglich von den Volumenfraktionen, aber nicht von der äußeren Last abhängt, für:

$$\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}) = \inf \left\{ \int_{\Omega} \nabla^s \varphi : \mathbb{C} : \left(\frac{1}{2} \nabla^s \varphi - \sum_{i=0}^n \chi_i \boldsymbol{\eta}_i \right) d\mathbf{y} \right. \\ \left. \varphi \in W_{\text{per}}^{1,2}(\Omega), \boldsymbol{\chi}(\mathbf{y}) \in \mathcal{P}_{\text{pure}}^{n+1}, \int_{\Omega} \boldsymbol{\chi}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \mathbf{c} \right\}. \quad (3.7)$$

Dieser Energieterm wird üblicher Weise als *Mischenergie* bezeichnet. Aufgrund der komplizierten Nebenbedingungen ist keine explizite Form dieser Gleichung bekannt. Lediglich für das so genannte “two-well problem” ($n = 2$), gelöst von Kohn (1991) und - unabhängig davon - Pipkin (1991), sowie für Sonderfälle von dreivarianten Materialien, Smyshlyaev and Willis (1998b), konnten bislang analytische Ausdrücke gefunden werden.

3.1. Abschätzung der Mischenergie durch obere und untere Grenzen

Um dennoch eine möglichst genaue Abschätzung der Energiedichte phasentransformierender Materialien zu erhalten, wird die Mischenergie mittels verschiedener Grenzen von oben und unten angenähert. Im Folgenden werden solche Grenzen vorgestellt.

3.1.1. Untere Reuß-Grenze

Die grundlegende Annahme zur Formulierung der Reuß-Grenze ist, dass die Spannung innerhalb des RVE konstant ist. Die gleiche Grenze lässt sich, wie in Govindjee et al. (2003) dargestellt, auch durch eine “Aufweichung” der Nebenbedingungen in Gl. (3.7) herleiten. Zur Vereinfachung der Formulierung werden die Verschiebungsfuktuationen φ und das Vektorfeld $\boldsymbol{\chi}$ in komplexe Fourierreihen entwickelt:

$$\varphi(\mathbf{y}) = \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Gamma} \varphi_{\boldsymbol{\xi}} e^{i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{y}}, \quad \boldsymbol{\chi}(\mathbf{y}) = \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Gamma} \boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\xi}} e^{i\boldsymbol{\xi} \cdot \mathbf{y}} \quad \text{mit } \Gamma = (2\pi\mathbb{Z})^d, \quad \varphi_0 = 0, \quad \boldsymbol{\chi}_0 = \mathbf{c}. \quad (3.8)$$

Das Symbol i steht hierbei für die imaginäre Einheit $i = \sqrt{-1}$. Da jede stückweise stetige und monotone Funktion durch eine Fourier-Reihe beliebig genau angenähert werden kann, stellt diese Darstellung keine Einschränkung des Modells dar.

Damit ergibt sich für die Mischenergie der Ausdruck

$$\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}) = \inf \left\{ \sum_{\boldsymbol{\xi} \in \Gamma} \frac{1}{2} \left(i\boldsymbol{\xi} \otimes^s \varphi_{\boldsymbol{\xi}} \right) : \mathbb{C} : \left(i\boldsymbol{\xi} \otimes^s \varphi_{\boldsymbol{\xi}} \right) \right. \\ \left. - \text{Re} \left(\left(i\boldsymbol{\xi} \otimes^s \varphi_{\boldsymbol{\xi}} \right) : \mathbb{C} : \sum_{i=0}^n \left(\boldsymbol{\chi}_{\boldsymbol{\xi}} \right)_i \boldsymbol{\eta}_i \right) \Big|_{\text{cons}} \right\}, \quad (3.9)$$

wobei cons hier noch für die Nebenbedingung $\chi(\mathbf{y}) \in \mathcal{P}_{\text{pure}}^{n+1}$ steht, da die Periodizität des Verschiebungsfluktuationfeldes und die korrekten gemittelten Volumenanteile bereits durch die Ansätze in Fourierreihen sichergestellt sind.

Minimiert man nun in Gl. (3.9) über alle symmetrischen Tensoren $\gamma = \bar{\gamma}^T \in \mathbb{C}^{d \times d}$ anstatt über alle Gradientenfelder $i\xi \otimes^s \varphi_{\xi}^T$, erhält man die Reuß-Grenze für die Mischenergie

$$\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}) \geq \psi_{\text{Reuß}}(\mathbf{c}) = -\frac{1}{2} \sum_{i=0}^n c_i \boldsymbol{\eta}_i : \mathbb{C} : \boldsymbol{\eta}_i + \frac{1}{2} \sum_{i=0}^n \sum_{k=0}^n c_i c_k \boldsymbol{\eta}_i : \mathbb{C} : \boldsymbol{\eta}_k. \quad (3.10)$$

Durch die Erweiterung der Menge zulässiger Mikrostrukturen, über die minimiert wird, werden potentiell tiefere Minima eingeschlossen. Bei der Reuß-Grenze handelt es sich also um eine untere Grenze der Mischenergie.

In Govindjee et al. (2003) konnte bewiesen werden, dass die Reuß-Grenze unter bestimmten Bedingungen exakt der quasikonvexifizierten Energiedichte entspricht. Hierzu wurde gezeigt, dass diese für einen Vektor \mathbf{c} unter folgenden Voraussetzungen mit der in Kapitel 3.1.3 erläuterten oberen Laminatgrenze erster Ordnung zusammenfällt:

1. Der Volumenanteilsvektor \mathbf{c} lässt sich als lineare Kombination zweier Vektoren $\mathbf{c}^{(1)}$ und $\mathbf{c}^{(2)}$ darstellen, für die die Reuß-Grenze exakt ist. Dies ist insbesondere für reine Varianten der Fall.
2. Die zu $\mathbf{c}^{(1)}$ und $\mathbf{c}^{(2)}$ gehörigen gemittelten Transformationsdehnungen

$$\boldsymbol{\eta}^{\mathbf{c}^{(1/2)}} = \sum_{i=0}^n c_i^{(1/2)} \boldsymbol{\eta}_i \quad (3.11)$$

sind Rang-1-kompatibel, es gilt also

$$\boldsymbol{\eta}^{\mathbf{c}^{(1)}} - \boldsymbol{\eta}^{\mathbf{c}^{(2)}} = \mathbf{a} \otimes^s \mathbf{b} \quad (3.12)$$

für zwei Vektoren $\mathbf{a}, \mathbf{b} \in \mathbb{R}^3$.

3.1.2. Untere \mathbb{H} -Maß-Grenze

Der Vollständigkeit halber sei hier auch die in Govindjee et al. (2003) hergeleitete \mathbb{H} -Maß-Grenze erwähnt.

Die in Tartar (1990) eingeführten \mathbb{H} -Maße sind eine vereinfachte Repräsentation von Mikrostrukturen. Hierzu wird, wie auch im vorhergehenden Abschnitt, der die Mikrostruktur charakterisierende Schaltvektor $\chi(\mathbf{y})$ in Fourier-Reihen entwickelt.

Diejenigen Fourier-Koeffizienten mit gleicher Richtung $\boldsymbol{\omega}$ (z.B. $\chi_{(1,2)}, \chi_{(2,4)}$, usw. für $\boldsymbol{\omega} = (1, 2) / \sqrt{5}$) werden aufsummiert, wodurch eine tensorwertige Funktion über der Menge aller Richtungen $\boldsymbol{\omega} \in \mathbb{S}^{d-1}$ entsteht:

$$\boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{\omega}) = \sum_{\xi \in \Gamma \setminus \{0\}, \xi/|\xi| = \boldsymbol{\omega}} \chi_{\xi} \otimes \bar{\chi}_{\xi}. \quad (3.13)$$

Diese Darstellung wird als \mathbb{H} -Maß bezeichnet.

Durch geeignete mathematische Umformungen, wie sie in Govindjee et al. (2003) und Heinen (2004a) dargestellt sind, lässt sich die Mischenergie wie folgt umformulieren:

$$\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}) = \inf \left\{ - \int_{\boldsymbol{\omega} \in \mathbb{S}^{d-1}} \mathbf{G}(\boldsymbol{\omega}) : \boldsymbol{\mu}(\boldsymbol{\omega}) d\boldsymbol{\omega} \mid \boldsymbol{\mu} \in \mathcal{H}(\mathbf{c}) \right\} \text{ mit} \quad (3.14)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{G}(\boldsymbol{\omega}) &= G_{kl} \mathbf{i}_k \mathbf{i}_l = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbb{C} : \boldsymbol{\eta}_k) \cdot \mathbf{T}(\boldsymbol{\omega})^{-1} \cdot (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbb{C} : \boldsymbol{\eta}_l) \mathbf{i}_k \mathbf{i}_l, \\ \mathbf{G}(\boldsymbol{\omega}) &\in \mathbb{R}_{\text{sym}}^{(n+1) \times (n+1)}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

und der Definition des so genannten Akustiktensors

$$\mathbf{u} \cdot \mathbf{T}(\boldsymbol{\omega}) \cdot \mathbf{u} = (\boldsymbol{\omega} \otimes^s \mathbf{u}) : \mathbb{C} : (\boldsymbol{\omega} \otimes^s \mathbf{u}) \in \mathbb{R}_{\text{sym}}^{d \times d}.$$

In Gl. (3.14) enthält die Menge $\mathcal{H}(\mathbf{c})$ genau diejenigen \mathbb{H} -Maße $\boldsymbol{\mu}$, für die $\int_{\Omega} \boldsymbol{\chi}(\mathbf{y}) d\mathbf{y} = \mathbf{c}$ gilt, die also eine Mikrostruktur mit den Volumenfraktionen \mathbf{c} repräsentieren. Da eben diese Menge jedoch nicht exakt bekannt ist, kann Gl. (3.14) in dieser Form noch nicht zur Berechnung der Mischenergie herangezogen werden.

Die Menge \mathcal{H} der zulässigen \mathbb{H} -Maße kann jedoch erneut erweitert werden, wodurch die Optimierung, wenn auch noch immer unter hohem mathematischen Aufwand, erleichtert wird. Hierdurch entsteht eine engere als die zuvor vorgestellte untere Grenze, die in Govindjee et al. (2003) näher beschrieben wird.

Zwar wäre es wünschenswert, die \mathbb{H} -Maß-Grenze als untere Grenze zu verwenden, allerdings ist momentan kein allgemein gültiges Verfahren bekannt, um diese zu berechnen. Aus diesem Grund wird hier auch auf eine detailliertere Darstellung verzichtet. Im Folgenden wird sich jedoch zeigen, dass mit der wesentlich einfacheren, in direkter Form vorliegenden, Reuß-Grenze bereits eine recht gute Annäherung der Mischenergie möglich ist.

3.1.3. Obere Laminatgrenze 1. Ordnung

In den bisher dargestellten Abschätzungen wurde die Menge der zulässigen Mikrostrukturen erweitert, um untere Grenzen der Mischenergie zu erhalten. Insbesondere mit der Reuß-Grenze konnten so verschiedene experimentelle Beobachtungen nachvollzogen werden, siehe zum Beispiel Govindjee and Miehe (2001); Hall and Govindjee (2001, 2002).

Um aber die Qualität der unteren Grenzen beurteilen zu können, ist es notwendig, sie mit oberen Grenzen zu vergleichen. Solche oberen Grenzen können durch Einschränkung der Betrachtungen auf bestimmte Mikrostrukturen erreicht werden. Aus einer Vielzahl von Experimenten ist bekannt, dass sich bei martensitischen Transformationen im Mikroskop so

genannte *laminare* Strukturen zeigen. Hierbei sind verschiedene kristallographische Varianten parallel zueinander und in der Regel in enger Abfolge angeordnet.

Die Abschätzung der Energiedichte laminarer Mikrostrukturen kann durch die so genannte Laminat-Mischformel realisiert werden, welche auf Avellaneda and Milton (1989); Tartar (1990); Kohn (1991) zurückgeht und in Govindjee et al. (2003) auf den n -varianten Fall erweitert wurde:

$$\psi_{\text{mix}}(\theta \mathbf{c}_1 + (1 - \theta) \mathbf{c}_2) \leq \theta \psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}_1) + (1 - \theta) \psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}_2) + \theta(1 - \theta) \phi(\mathbf{c}_1 - \mathbf{c}_2). \quad (3.16)$$

Der Parameter $0 \leq \theta \leq 1$ stellt hierbei einen ‘‘Mischparameter’’ dar, welcher eine Kombination zweier Volumenanteilsvektoren \mathbf{c}_1 und \mathbf{c}_2 erzeugt. Diese Formel ist insbesondere dann hilfreich, wenn die Mischenergie für \mathbf{c}_1 bzw. \mathbf{c}_2 zuvor bereits zumindest näherungsweise bekannt war.

Die oben eingeführte Funktion ϕ ist für einen beliebigen Vektor $\boldsymbol{\kappa}$ wie folgt definiert:

$$\phi(\boldsymbol{\kappa}) := \inf \{ -\mathbf{G}(\boldsymbol{\omega}) : (\boldsymbol{\kappa} \otimes \boldsymbol{\kappa}) | \boldsymbol{\omega} \in \mathbb{S}^{d-1} \} \quad (3.17)$$

mit $\mathbf{G}(\boldsymbol{\omega})$ nach Gl. (3.15).

Die Herleitung dieser Abschätzung basiert erneut auf einer Formulierung in \mathbb{H} -Maßen. Der interessierte Leser sei an dieser Stelle auf Govindjee et al. (2003) verwiesen.

Aus der Definition der Mischenergie nach Gl. (3.7) wird deutlich, dass diese für eine reine Variante $\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c} = \mathbf{i}_i) = 0$ ist: in diesem Falle wird nämlich der Term $\sum_{i=0}^n \chi_i \boldsymbol{\eta}_i$ zu einer Konstanten, welche, multipliziert mit der periodischen Störung $\nabla^s \varphi$, im Mittelwert über das RVE null ergibt. Die Mischenergie für reine Varianten ist somit das Minimum einer rein quadratischen Funktion in $\nabla^s \varphi$, welches ebenfalls null ist.

Es bietet sich somit an, eine Laminatgrenze aufbauend auf reinen Varianten zu konstruieren, da für diese ψ_{mix} bekannt ist. Hierzu wird zunächst die Schreibweise

$$\mathbf{c}^{(i)} = (c_0 + \dots + c_i)^{-1} (c_0 \mathbf{i}_0 + \dots + c_i \mathbf{i}_i) \quad (3.18)$$

eingeführt, mit welcher sich folgende obere Grenze ergibt:

$$\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}) \leq \psi_{\text{lam}}^*(\mathbf{c}) = \sum_{i=1}^n \frac{(c_0 + \dots + c_{i-1}) c_i}{c_0 + \dots + c_i} \phi(\mathbf{c}^{(i-1)} - \mathbf{i}_i). \quad (3.19)$$

Der Wert der so formulierten Grenze hängt nun noch davon ab, in welcher Reihenfolge die Varianten berücksichtigt werden, bzw. wie diese nebeneinander angeordnet sind. Mathematisch entspricht dies der Betrachtung aller möglicher Permutationen des *Phasenanteilsvektors*¹ \mathbf{c} .

Um die Gültigkeit von Gl. (3.19) zu beweisen, bedient man sich einer ‘‘umgekehrten’’ *vollständigen Induktion*. Hierzu wird zunächst als *Induktionsverankerung* die letzte Kompen-

¹Der *Phasenanteilsvektor* führt in diesem Modell die Volumenanteile der verschiedenen Martensitvarianten separat auf, insofern könnte er auch als Phasen- und Variantenanteilsvektor bezeichnet werden, worauf hier aber zur Vereinfachung der Schreibweise verzichtet wird; dies entspricht der in der Mechanik üblichen Terminologie, in der häufig nicht zwischen Phasen und Varianten unterschieden wird.

te, c_n , von ψ_{mix} unter Verwendung von Gl. (3.16) abgespalten:

$$\begin{aligned}
\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}) &= \psi_{\text{mix}}\left((c_0 + \cdots + c_{n-1})\mathbf{c}^{(n-1)} + c_n\mathbf{i}_n\right) \\
&\leq (c_0 + \cdots + c_{n-1})\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}^{(n-1)}) + c_n \underbrace{\psi_{\text{mix}}(\mathbf{i}_n)}_{=0} \\
&\quad + (c_0 + \cdots + c_{n-1})c_n\phi(\mathbf{c}^{(n-1)} - \mathbf{i}_n) \\
&= (c_0 + \cdots + c_{n-1})\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}^{(n-1)}) + \sum_{i=n}^n \frac{(c_0 + \cdots + c_{i-1})c_i}{c_0 + \cdots + c_i}\phi(\mathbf{c}^{(i-1)} - \mathbf{i}_i),
\end{aligned} \tag{3.20}$$

wobei die Nebenbedingung $\sum_{i=0}^n c_i = 1$ verwendet wurde.

Analog werden nun auch alle weiteren Komponenten abgespalten. Hierzu werde zunächst als *Induktionshypothese* angenommen, dass

$$\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}) \leq (c_0 + \cdots + c_{k-1})\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}^{(k-1)}) + \sum_{i=k}^n \frac{(c_0 + \cdots + c_{i-1})c_i}{c_0 + \cdots + c_i}\phi(\mathbf{c}^{(i-1)} - \mathbf{i}_i) \tag{3.21}$$

für ein k mit $2 \leq k \leq n$ gelte. Darauf aufbauend kann als *Induktionsschluss* Folgendes gezeigt werden:

$$\begin{aligned}
\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}) &\leq (c_0 + \cdots + c_{k-1})\psi_{\text{mix}}\left(\frac{c_0 + \cdots + c_{k-2}}{c_0 + \cdots + c_{k-1}}\mathbf{c}^{(k-2)} + \frac{c_{k-1}}{c_0 + \cdots + c_{k-1}}\mathbf{i}_{k-1}\right) \\
&\quad + \sum_{i=k}^n \frac{(c_0 + \cdots + c_{i-1})c_i}{c_0 + \cdots + c_i}\phi(\mathbf{c}^{(i-1)} - \mathbf{i}_i) \\
&\leq (c_0 + \cdots + c_{k-1}) \left[\frac{c_0 + \cdots + c_{k-2}}{c_0 + \cdots + c_{k-1}}\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}^{(k-2)}) + \right. \\
&\quad \left. \frac{c_{k-1}}{c_0 + \cdots + c_{k-1}} \underbrace{\psi_{\text{mix}}(\mathbf{i}_{k-1})}_{=0} + \frac{(c_0 + \cdots + c_{k-2})c_{k-1}}{(c_0 + \cdots + c_{k-1})^2}\phi(\mathbf{c}^{(k-2)} - \mathbf{i}_{k-1}) \right] \\
&\quad + \sum_{i=k}^n \frac{(c_0 + \cdots + c_{i-1})c_i}{c_0 + \cdots + c_i}\phi(\mathbf{c}^{(i-1)} - \mathbf{i}_i) \\
&= (c_0 + \cdots + c_{k-2})\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}^{(k-2)}) + \sum_{i=k-1}^n \frac{(c_0 + \cdots + c_{i-1})c_i}{c_0 + \cdots + c_i}\phi(\mathbf{c}^{(i-1)} - \mathbf{i}_i).
\end{aligned} \tag{3.22}$$

Wendet man nun Gl. (3.22) von $k = n$, wofür (3.21) zuvor bewiesen wurde, wiederholt absteigend bis $k = 2$ an, erhält man

$$\begin{aligned}
\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}) &\leq c_0 \underbrace{\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}^{(0)})}_{=\psi_{\text{mix}}(\mathbf{i}_0)=0} + \sum_{i=1}^n \frac{(c_0 + \cdots + c_{i-1})c_i}{c_0 + \cdots + c_i}\phi(\mathbf{c}^{(i-1)} - \mathbf{i}_i) \\
&= \sum_{i=1}^n \frac{(c_0 + \cdots + c_{i-1})c_i}{c_0 + \cdots + c_i}\phi(\mathbf{c}^{(i-1)} - \mathbf{i}_i) = \psi_{\text{lam}}^*,
\end{aligned} \tag{3.23}$$

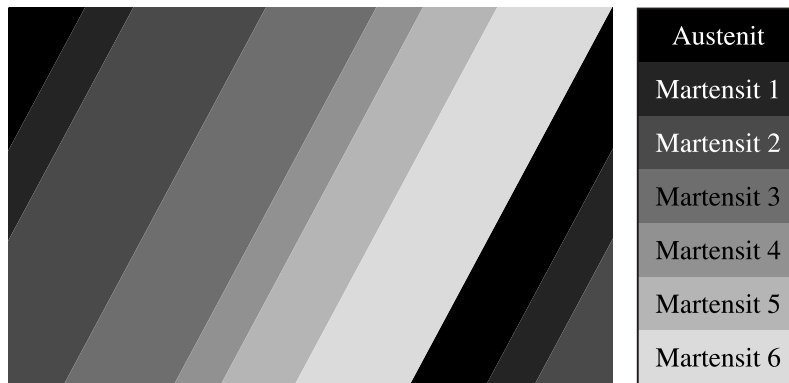


Abbildung 3.1.: Skizze Laminat erster Ordnung.

womit die obere Laminatgrenze in dieser Form bewiesen wurde.

Anschaulich entspricht diese Vorgehensweise der Berechnung zunächst der Energie aus einem Laminat der ersten beiden Varianten im jeweiligen Volumenverhältnis, welches dann nacheinander um die Anteile aller anderen Varianten ergänzt wird. Die hierdurch entstehende Anordnung der Varianten, ein so genanntes Laminat erster Ordnung, ist in Abb. 3.1 dargestellt.

Erste dementsprechende Ansätze wurden in Govindjee et al. (2003) formuliert, die dann in Heinen (2004a) anhand einer Reihe numerischer Beispiele getestet wurden. Hierbei wurde offensichtlich, dass sich die obere Grenze $\psi_{\text{lam}}^*(\mathbf{c})$ zwar für eine grobe Abschätzung der tatsächlichen Mischenergie eignet, aber noch zu ungenau ist, um anhand dieser präzise Aussagen über die Qualität anderer Grenzen, insbesondere der Reuß-Grenze, machen zu können. Diese Ungenauigkeit zeigt sich insbesondere auch in der Beobachtung, dass die oben vorgestellte Laminatgrenze häufig zu deutlich nichtkonvexen Energieverläufen führt. Die Laminatgrenze erster Ordnung unterscheidet sich daher deutlich von der gesuchten quasi-konvexen Hülle und ist des Weiteren numerisch nur schwer handhabbar.

3.1.4. Obere Laminatgrenze 2. Ordnung

Aufgrund der Defizite der Laminatgrenze erster Ordnung liegt es nahe, die Betrachtung auf kompliziertere Mikrostrukturen, wie zum Beispiel Lamine zweite und höherer Ordnung, zu erweitern. Mathematisch gesehen entstehen diese, wenn die Mischenergie durch Zusammenfügung mehrerer Teil-Lamine zu einem Gesamt-Laminat hergeleitet wird. Ein solches allgemeines Laminat zweiter Ordnung ist in Abb. 3.2 dargestellt. Jedes der Teillamine kann dabei im allgemeinen Fall aus einer beliebigen Variantenanzahl (von 1 bis $n + 1$) bestehen. Auch die Anzahl der Teillamine, aus denen das Gesamtlaminat bestehen soll, ist beliebig.

Die energetische Abschätzung allgemeiner Lamine höherer Ordnung ist aufgrund der hohen Anzahl von Freiheitsgraden numerisch nicht realisierbar. In Heinen (2004a) wurden bereits erste Beispiele spezieller Lamine vorgestellt. Hierbei wurden jeweils zwei Teillamine betrachtet, in denen der Anteil einer Variante erhöht bzw. erniedrigt wurde. Hierdurch konnte zwar eine leichte Verbesserung der oberen Laminatgrenze erzielt werden, die

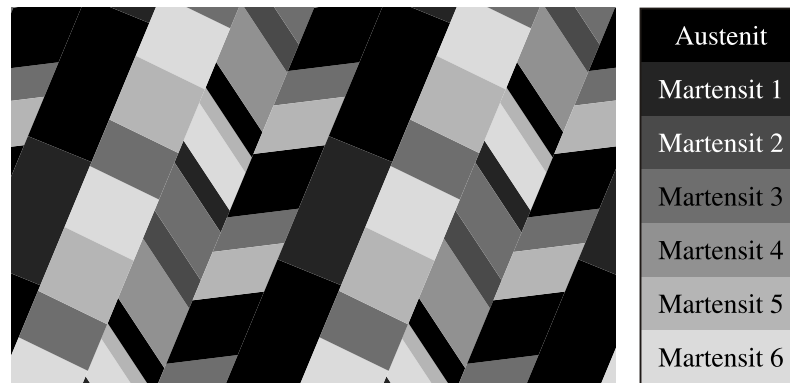


Abbildung 3.2.: Skizze allgemeines Laminat zweiter Ordnung.

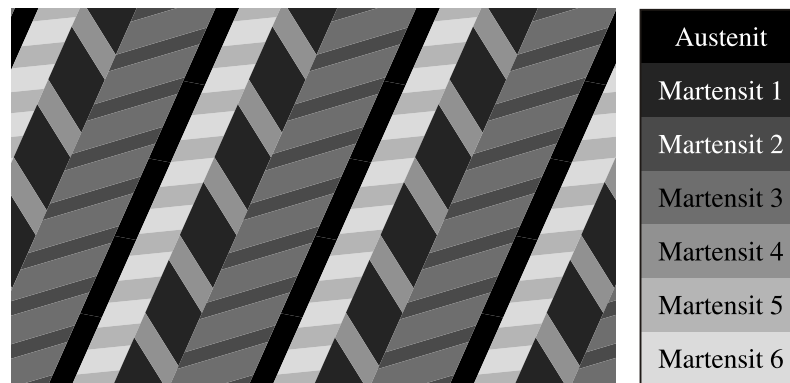


Abbildung 3.3.: Skizze Laminat zweiter Ordnung, bestehend aus Austenit und Martensitzwillingen.

jedoch auch mit einer wesentlichen Erhöhung des numerischen Aufwands einherging.

Die im Folgenden hergeleitete Laminatgrenze zweiter Ordnung wurde erstmalig in Heinen et al. (2006) präsentiert und in Govindjee et al. (2007) ausführlicher erläutert.

Eine Vielzahl experimenteller Untersuchungen weisen andere Anordnungen von speziellen Laminaten auf: als Mikrostruktur bilden sich hier so genannte martensitische Zwillinge aus. In dieser Anordnung finden sich genau zwei Martensitvarianten in eng wechselnder Abfolge in der höchsten Laminatordnung, wie in Abb. 3.3 dargestellt.

Die Paarungen der Varianten, die für eine derartige Zwillingsbildung in Betracht zu ziehen sind, wird in Ball and James (1987) im allgemeinen Fall und in Bhattacharya (2003) für kleine Verformungen diskutiert. Hierbei wird insbesondere berücksichtigt, dass es bei zwei Varianten, die spannungsfreie Grenzflächen bilden können, stets mindestens eine Grenzebene geben muss, die durch beide Transformationsdehnungen gleich verzerrt wird. Die Transformationsdehnungen $\boldsymbol{\eta}_i$ und $\boldsymbol{\eta}_j$ müssen dementsprechend folgende Gleichung erfüllen:

$$\boldsymbol{\eta}_i - \boldsymbol{\eta}_j = \frac{1}{2} (\mathbf{n} \otimes \mathbf{a} + \mathbf{a} \otimes \mathbf{n}), \quad (3.24)$$

wobei \mathbf{a} ein Skalierungsvektor und \mathbf{n} ein Normalenvektor auf die Grenzebene ist.

Die Existenz einer Lösung dieser Gleichung kann durch folgende Berechnung überprüft

werden:

- Berechne $\boldsymbol{\eta}_{\text{twin}} = \boldsymbol{\eta}_i - \boldsymbol{\eta}_j$.
- Finde Eigenwerte λ_1, λ_2 und λ_3 von $\boldsymbol{\eta}_{\text{twin}}$ mit $\lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \lambda_3$.
- $\boldsymbol{\eta}_i$ und $\boldsymbol{\eta}_j$ sind genau dann *zwillingskompatibel* wenn $\lambda_2 = 0$.

Wenn Gl. (3.24) lösbar ist, so sind

- $\mathbf{n} = \frac{-\kappa\sqrt{-\lambda_1}\mathbf{e}_{\lambda_1} + \sqrt{\lambda_3}\mathbf{e}_{\lambda_3}}{\sqrt{2(\lambda_3 - \lambda_1)}}$ und
- $\mathbf{a} = \sqrt{2(\lambda_3 - \lambda_1)} (\kappa\sqrt{-\lambda_1}\mathbf{e}_{\lambda_1} + \sqrt{\lambda_3}\mathbf{e}_{\lambda_3})$

mit $\kappa = \pm 1$ gleichwertige Lösungen. Für die folgenden Betrachtungen wird stets die Lösung mit $\kappa = 1$ gewählt.

Als Beispiel seien hier drei verschiedene Materialien genannt, und zwar kubisch-tetragonal transformierendes NiAl, sowie kubisch-orthorhombisch und kubisch-monoklin transformierendes CuAlNi. Die elastischen Konstanten und die Transformationsdehnungen dieser Materialien sind im Anhang B abgedruckt. In Tabellen 3.1 bis 3.3 ist angegeben, welche Varianten dieser Materialien miteinander Zwillinge bilden können.

Variante	Austenit	Martensit 1	Martensit 2	Martensit 3
Austenit	–	nein	nein	nein
Martensit 1	nein	–	ja	ja
Martensit 2	nein	ja	–	ja
Martensit 3	nein	ja	ja	–

Tabelle 3.1.: Zwillingskompatible Paarungen der Transformationsdehnungen, kubisch-tetragonal transformierendes NiAl.

Variante	Austenit	Mart. 1	Mart. 2	Mart. 3	Mart. 4	Mart. 5	Mart. 6
Austenit	–	nein	nein	nein	nein	nein	nein
Martensit 1	nein	–	ja	ja	ja	ja	ja
Martensit 2	nein	ja	–	ja	ja	ja	ja
Martensit 3	nein	ja	ja	–	ja	ja	ja
Martensit 4	nein	ja	ja	ja	–	ja	ja
Martensit 5	nein	ja	ja	ja	ja	–	ja
Martensit 6	nein	ja	ja	ja	ja	ja	–

Tabelle 3.2.: Zwillingskompatible Paarungen der Transformationsdehnungen, kubisch-orthorhombisch transformierendes CuAlNi.

Für das kubisch-tetragonal und kubisch-orthorhombisch transformierende Material zeigt sich, dass alle Martensitvarianten miteinander Zwillinge bilden können. Im Falle der kubisch-monoklinen Transformation hingegen sind 24 der 66 Paarungen nicht zwillingskompatibel. Diese Eigenschaft kann zur Eingrenzung der berücksichtigten Mikrostrukturen zur Berechnung der Laminatgrenze verwendet werden.

Variante	A	M1	M2	M3	M4	M5	M6	M7	M8	M9	M10	M11	M12
Austenit	-	n	n	n	n	n	n	n	n	n	n	n	n
Mart. 1	n	-	j	j	j	j	j	n	n	n	n	j	j
Mart. 2	n	j	-	j	j	j	j	n	n	n	n	j	j
Mart. 3	n	j	j	-	j	n	n	j	j	j	j	n	n
Mart. 4	n	j	j	j	-	n	n	j	j	j	j	n	n
Mart. 5	n	j	j	n	n	-	j	j	j	j	j	n	n
Mart. 6	n	j	j	n	n	j	-	j	j	j	j	n	n
Mart. 7	n	n	n	j	j	j	j	-	j	n	n	j	j
Mart. 8	n	n	n	j	j	j	j	j	-	n	n	j	j
Mart. 9	n	n	n	j	j	j	j	n	n	-	j	j	j
Mart. 10	n	n	n	j	j	j	j	n	n	j	-	j	j
Mart. 11	n	j	j	n	n	n	n	j	j	j	j	-	j
Mart. 12	n	j	j	n	n	n	n	j	j	j	j	j	-

Tabelle 3.3.: Zwillingskompatible Paarungen der Transformationsdehnungen, kubisch-monoklin transformierendes CuAlNi.

Hierzu wird zunächst der Volumenanteilsvektor \mathbf{c} wie folgt sortiert: c_0 sei die Austenitvariante und die verbleibenden Martensitpaare (c_1 und c_2 , c_3 und c_4 , usw.) seien zwillingskompatibel. Hierdurch ergeben sich für orthorhombischen Martensit 15 und für monoklinen Martensit bereits 955 mögliche Kombinationen der Martensitvarianten zu drei bzw. sechs kompatiblen Zwillingen.

Analog zum Laminat erster Ordnung lässt sich nun für die in Abb. 3.3 skizzierte Anordnung der Varianten in einem Austenit- und mehreren Martensitzwillingsstreifen eine weitere obere Grenze für die relaxierte Energie herleiten:

$$\begin{aligned} \psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}) \leq \psi_{\text{lam}}(\mathbf{c}) &= \sum_{K=1}^M d_K \theta_K (1 - \theta_K) \phi(\mathbf{i}_{2K-1} - \mathbf{i}_{2K}) \\ &+ \sum_{K=1}^M \frac{(d_0 + d_1 + \dots + d_{K-1}) d_K}{d_0 + d_1 + \dots + d_K} \phi(\mathbf{d}_{K-1} - \theta_K), \end{aligned} \quad (3.25)$$

was im Folgenden gezeigt wird.

In Gl. (3.25) wurde folgende Notation verwendet:

- K läuft jeweils über die $M = n/2$ Zwillinge.
- $\theta_K = \frac{c_{2K-1}}{c_{2K-1} + c_{2K}}$ ist der Volumenanteil der ersten Variante innerhalb des K ten Zwillings.
- $\boldsymbol{\theta}_K = \theta_K \mathbf{i}_{2K-1} + (1 - \theta_K) \mathbf{i}_{2K}$ ist der normierte Phasenanteilsvektor des K ten Zwillings.
- $d_K = c_{2K-1} + c_{2K}$ ist der Volumenanteil des K ten Zwillings an der gesamten Mikrostruktur.

- $\mathbf{d}_K = \sum_{J=0}^K d_J \boldsymbol{\theta}_J / \sum_{J=0}^K d_J$ ist ein Vektor, der die normierte Summe der Austenit- und aller Martensitzwillingsanteile bis zum K ten Zwilling enthält.
- Entsprechend wird für die Austenitvariante $\boldsymbol{\theta}_0 = (1, 0, \dots, 0)^T$ und $d_0 = c_0$ gesetzt.

Weitere obere Grenzen nach Gl. (3.25) entstehen durch Permutation der Reihenfolge, in der diese berechnet werden. Insgesamt ergeben sich dadurch für jede einzelne der 955 möglichen Zwillingspaarungen für kubisch-monoklin transformierendes Materialverhalten 720, im allgemeinen leicht unterschiedliche, Werte der oberen Grenze.

Der Beweis der Laminatgrenze zweiter Ordnung erfolgt erneut durch umgekehrte vollständige Induktion, indem zunächst der letzte Zwilling abgespalten wird:

$$\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}) = \psi_{\text{mix}}((d_0 + d_1 + \dots + d_{m-1}) \mathbf{d}_{m-1} + d_m \boldsymbol{\theta}_m), \quad (3.26)$$

was mit Gl. (3.16) zu

$$\begin{aligned} \psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}) &\leq (d_0 + d_1 + \dots + d_{M-1}) \psi_{\text{mix}}(\mathbf{d}_{M-1}) + d_M \psi_{\text{mix}}(\boldsymbol{\theta}_M) \\ &\quad + (d_0 + d_1 + \dots + d_{M-1}) d_M \phi(\mathbf{d}_{M-1} - \boldsymbol{\theta}_M) \\ &= (d_0 + d_1 + \dots + d_{M-1}) \psi_{\text{mix}}(\mathbf{d}_{M-1}) \\ &\quad + d_M \psi_{\text{mix}}(\theta_M \mathbf{i}_{2M-1} + (1 - \theta_M) \mathbf{i}_{2M}) \\ &\quad + (d_0 + d_1 + \dots + d_{M-1}) d_M \phi(\mathbf{d}_{M-1} - \boldsymbol{\theta}_M) \\ &\leq (d_0 + d_1 + \dots + d_{M-1}) \psi_{\text{mix}}(\mathbf{d}_{M-1}) \\ &\quad + d_M \left[\underbrace{\theta_M \psi_{\text{mix}}(\mathbf{i}_{2M-1})}_{=0} + (1 - \theta_M) \underbrace{\psi_{\text{mix}}(\mathbf{i}_{2M})}_{=0} \right. \\ &\quad \left. + \theta_M (1 - \theta_M) \phi(\mathbf{i}_{2M-1} - \mathbf{i}_{2M}) \right] \\ &\quad + (d_0 + d_1 + \dots + d_{M-1}) d_M \phi(\mathbf{d}_{M-1} - \boldsymbol{\theta}_M) \\ &= (d_0 + d_1 + \dots + d_{M-1}) \psi_{\text{mix}}(\mathbf{d}_{M-1}) \\ &\quad + d_M \theta_M (1 - \theta_M) \phi(\mathbf{i}_{2M-1} - \mathbf{i}_{2M}) \\ &\quad + \underbrace{\frac{(d_0 + d_1 + \dots + d_{M-1}) d_M}{d_0 + d_1 + \dots + d_M}}_{=1} \phi(\mathbf{d}_{M-1} - \boldsymbol{\theta}_M) \end{aligned} \quad (3.27)$$

umgeformt werden kann.

Es werde nun angenommen, dass

$$\begin{aligned} \psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}) &\leq (d_0 + \dots + d_{J-1}) \psi_{\text{mix}}(\mathbf{d}_{J-1}) \\ &\quad + \sum_{K=J}^M d_K \theta_K (1 - \theta_K) \phi(\mathbf{i}_{2K-1} - \mathbf{i}_{2K}) \\ &\quad + \sum_{K=J}^M \frac{(d_0 + d_1 + \dots + d_{K-1}) d_K}{d_0 + d_1 + \dots + d_K} \phi(\mathbf{d}_{K-1} - \boldsymbol{\theta}_K) \end{aligned} \quad (3.28)$$

für ein $2 \leq J \leq M$ gelte. Für $J = M$ wurde dies in Gl. 3.27 bereits gezeigt. Davon ausgehend kann dann gezeigt werden, dass Gl. (3.28) auch für $J - 1$ gilt:

$$\begin{aligned}
\psi_{\text{mix}}(\mathbf{c}) &\leq (d_0 + \cdots + d_{J-1}) \psi_{\text{mix}} \left(\frac{d_0 + \cdots + d_{J-2}}{d_0 + \cdots + d_{J-1}} \mathbf{d}_{J-2} + \frac{d_{J-1}}{d_0 + \cdots + d_{J-1}} \boldsymbol{\theta}_{J-1} \right) \\
&\quad + \sum_{K=J}^M d_K \theta_K (1 - \theta_K) \phi(\mathbf{i}_{2K-1} - \mathbf{i}_{2K}) \\
&\quad + \sum_{K=J}^M \frac{(d_0 + d_1 + \cdots + d_{K-1}) d_K}{d_0 + d_1 + \cdots + d_K} \phi(\mathbf{d}_{K-1} - \boldsymbol{\theta}_K) \\
&\leq (d_0 + \cdots + d_{J-1}) \left[\frac{d_0 + \cdots + d_{J-2}}{d_0 + \cdots + d_{J-1}} \psi_{\text{mix}}(\mathbf{d}_{J-2}) \right. \\
&\quad \left. + \frac{d_{J-1}}{d_0 + \cdots + d_{J-1}} \psi_{\text{mix}}(\boldsymbol{\theta}_{J-1}) + \frac{(d_0 + \cdots + d_{J-2}) d_{J-1}}{(d_0 + \cdots + d_{J-1})^2} \phi(\mathbf{d}_{J-2} - \boldsymbol{\theta}_{J-1}) \right] \\
&\quad + \sum_{K=J}^M d_K \theta_K (1 - \theta_K) \phi(\mathbf{i}_{2K-1} - \mathbf{i}_{2K}) \\
&\quad + \sum_{K=J}^M \frac{(d_0 + d_1 + \cdots + d_{K-1}) d_K}{d_0 + d_1 + \cdots + d_K} \phi(\mathbf{d}_{K-1} - \boldsymbol{\theta}_K) \\
&\leq (d_0 + \cdots + d_{J-2}) \psi_{\text{mix}}(\mathbf{d}_{J-2}) \\
&\quad + \sum_{K=J-1}^M d_K \theta_K (1 - \theta_K) \phi(\mathbf{i}_{2K-1} - \mathbf{i}_{2K}) \\
&\quad + \sum_{K=J-1}^M \frac{(d_0 + d_1 + \cdots + d_{K-1}) d_K}{d_0 + d_1 + \cdots + d_K} \phi(\mathbf{d}_{K-1} - \boldsymbol{\theta}_K).
\end{aligned} \tag{3.29}$$

Damit ist bewiesen, dass Gl. (3.28) für alle $2 \leq J \leq M$ gilt. Einsetzen von $J = 2$ in (3.28) liefert schließlich die Laminatgrenze für verzwilligte Lamine, Gl. (3.25).

3.1.5. Obere Taylorgrenze

Bei genauerer Betrachtung der in Gl. (3.7) definierten Mischenergie fällt auf, dass diese stets nicht-positiv ist. Wird ein im Verhältnis zu den Transformationsdehnungen kleiner Perturbationsgradient gewählt, ist der zweite Summand im Integranden dominant und es ergibt sich ein negativer Wert.

Eine Ausnahme bildet der einvariante Fall: hier wird der zweite Summand aufgrund der Periodizität des Perturbationsfeldes zu null. Das gesuchte Minimum ist dann das eines quadratischen Funktionals, welches durch die triviale Lösung $\boldsymbol{\varphi} = \mathbf{0}$ minimal wird. Die Mischenergie reiner Varianten ist damit, wie oben bereits erwähnt, null.

Als triviale obere Grenze für die Mischenergie kann daher die so genannte Taylor-Grenze

$$\psi_{\text{mix}} \leq \psi_{\text{Taylor}}(\mathbf{c}) = 0 \tag{3.30}$$

gewählt werden.

Die Taylor-Grenze entspricht der Annahme, dass an jedem Punkt, und somit auch für jede Variante, innerhalb einer Mikrostruktur der gleiche Dehnungszustand herrscht.

3.1.6. Unrelaxierte Energie als obere Grenze

Wird nicht gezielt die Mischenergie, sondern die gesamte Energiedichte betrachtet, kann auch die unrelaxierte Energie nach Gl. (3.1) als einfache obere Grenze für die quasikonvexe Hülle betrachtet werden.

Hierdurch wird im Folgenden auch deutlich werden, um welchen Anteil phasentransformierende Materialien wie Formgedächtnislegierungen ihre Gesamtenergie durch Ausbildung einer Mikrostruktur senken können.

Der Unterschied zwischen der unrelaxierten Energie als obere Grenze und der Taylor-Grenze besteht darin, dass letztere auch andere Volumenfraktionen als null oder eins zulässt. Für eine vollständige Relaxierung entfällt dieser Unterschied, da, wie man trivialerweise sieht, die Taylor-Grenze stets von reinen Varianten minimiert wird.

3.2. Vergleich der Grenzen für feste Volumenfraktionen

Durch den direkten Vergleich von oberen und unteren Grenzen kann zum Einen die tatsächliche quasikonvexifizierte Energiedichte eingegrenzt werden. Zum Anderen lassen sich hierdurch Rückschlüsse auf die Qualität der verschiedenen Grenzen als Abschätzungen ziehen.

Die oben betrachteten Grenzen unterscheiden sich, mit Ausnahme der unrelaxierten Energie, lediglich in der Mischenergie. Für einen ersten Vergleich muss daher auch nur dieser nicht lastabhängige Energieanteil herangezogen werden, der zunächst für vorgegebene Volumenanteilsprofile verglichen werden soll.

Ein dementsprechender Vergleich ist in Abb. 3.4 - 3.7 zu finden. Hierbei spiegeln Abb. 3.4 und 3.5 das Modellverhalten für kubisch-orthorhombisch und Abb. 3.6 und 3.7 kubisch-monoklin transformierendes Material wieder. Die hier verwendeten sieben-varianten Materialdaten gehen auf Sedláček et al. (2005) zurück und sind in Anhang B.2 dargestellt, die 13-varianten wurden von Otsuka et al. (1974) gemessen und sind in B.3 aufgeführt.

In Abb. 3.4 wurde recht willkürlich ein Pfad von reinem Austenit zu einer gleichmäßigen Mischung aller Martensite vorgegeben. In Abb. 3.5 hingegen wurde der Pfad so gewählt, dass er weit von denjenigen Bereichen entfernt ist, für die die Exaktheit der Reuß-Grenze bekannt ist, siehe S. 26. Zu diesem Zweck wurden der Start- und der Endvektor so gewählt, dass $\text{Det } \boldsymbol{\eta}^{\text{cStart}}$ und $\text{Det } \boldsymbol{\eta}^{\text{cEnd}}$ möglichst unterschiedlich sind, wodurch die Bedingung (3.12) für die Exaktheit der Reuß-Grenze nicht erfüllt ist.

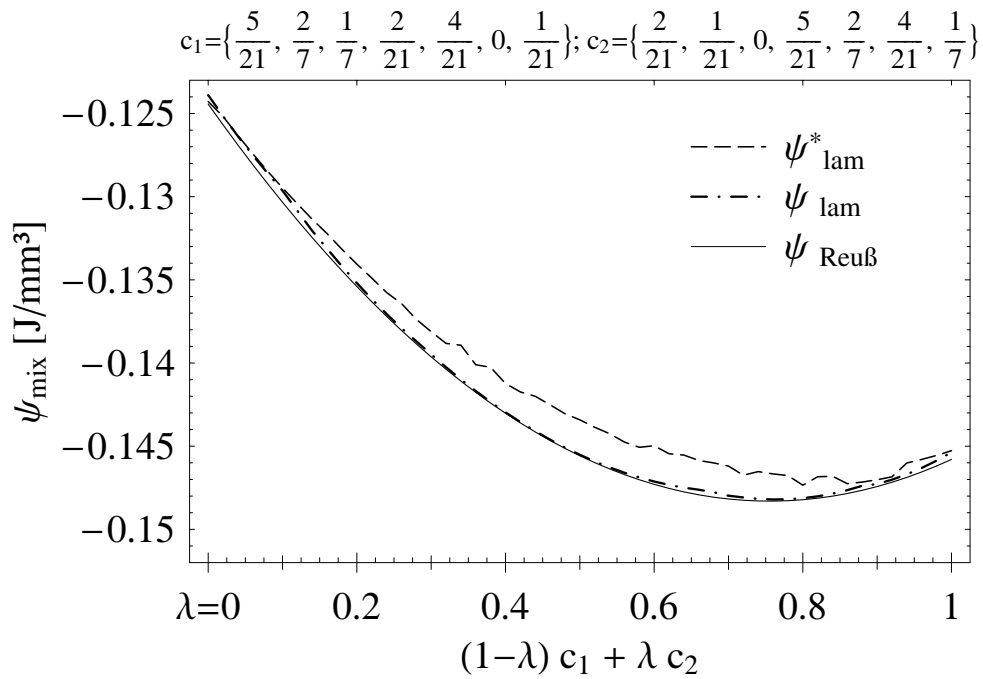


Abbildung 3.4.: Vergleich der Mischenergie-Grenzen für feste Volumenfraktionen.
Kubisch-orthorhombisch transformierendes Material.
Pfad von einer Austenit-Martensit-Mischung zur anderen.

Bezüglich der Rechenzeit für die hier vorgestellten Beispiele ist zu beachten, dass die Funktion ϕ nach Gl. (3.17) zwar lediglich über alle Einheitsvektoren $\omega \in \mathbb{S}^2$ minimiert wird; da diese aber für die hier vorgestellten oberen Laminatgrenzen sehr häufig aufgerufen wird, ist ihre Auswertung dennoch die Ursache für den hohen Zeitaufwand bei der Berechnung dieser Grenzen. Wie aus dem Vergleich der Definitionen (3.19) und (3.25) zu erkennen ist, erfordern beide Grenzen die gleiche Anzahl von ϕ -Aufrufen. Aufgrund der einfacheren Funktionsargumente in der verzwilligten Grenze ist die benötigte Rechenzeit hier allerdings im Allgemeinen wesentlich geringer.

Weiterhin wird deutlich, dass die Verwendung der oben erläuterten verzwilligten Laminatstruktur zweiter Ordnung neben der Rechenzeitverkürzung auch eine wesentliche Qualitätssteigerung mit sich bringt. So ist zum Beispiel die Abweichung zwischen $\psi_{\text{Reuß}}$ und ψ_{lam}^* bis zu 45mal größer als die zwischen $\psi_{\text{Reuß}}$ und ψ_{lam} .

Im Falle von $\psi_{\text{Reuß}}$ und ψ_{lam} liegt die maximale Abweichung beider Grenzen bei einem halben Prozent in Abb. 3.4 und drei Prozent in Abb. 3.5. Die größere Abweichung im zweiten Plot ist vermutlich darauf zurückzuführen, dass in diesem Beispiel die Volumenanteile aller Martensitvarianten stets gleich groß ist. Hierdurch werden verschiedene Zwillingkombinationen energetisch äquivalent, was eine Verringerung der Flexibilität der Laminatgrenze zweiter Ordnung zur Folge hat. Ferner ist zu beobachten, dass auch die Konvexitätseigenschaften der Laminatgrenze zweiter Ordnung wesentlich besser sind als die mit dem einfacheren Laminat erzielten. Dies ist insbesondere für die in Kapitel 3.3 erläuterte vollständige Relaxierung der Energie von Bedeutung.

Im Falle des dreizehn-varianten kubisch zu monoklin transformierenden CuAlNi ist insbesondere die Qualität der Laminatgrenze zweiter Ordnung noch deutlich höher als im sieben-

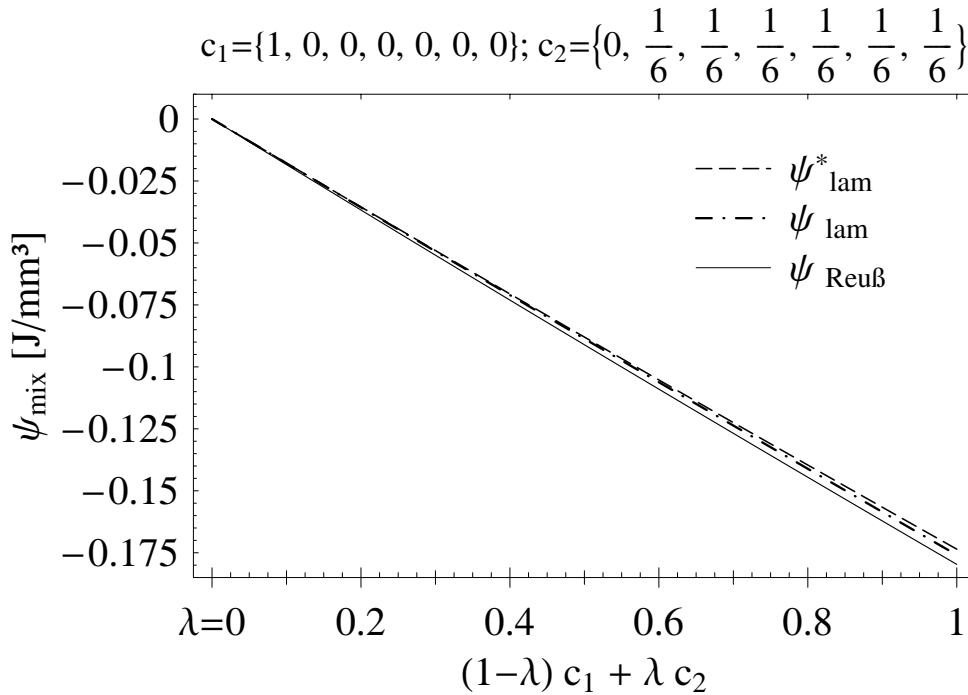


Abbildung 3.5.: Vergleich der Mischenergie-Grenzen für feste Volumenfraktionen.
Kubisch-orthorhombisch transformierendes Material.
Pfad von reinem Austenit zu gleichmäßiger Mischung aller Martensite.

varianten. Hier beträgt die maximale Abweichung zwischen $\psi_{\text{Reuß}}$ und ψ_{lam} , die in Abb. 3.6 und 3.7 jeweils auch vergrößert dargestellt ist, nur noch 0,8 bzw. 1,2 Promill, während die Laminatgrenze erster Ordnung eine bis zu 200fach höhere Abweichung von der Reuß-Grenze aufweist als die zweite Ordnung.

In der Berechnung von ψ_{lam}^* wurde die Anzahl der ausgewerteten Permutationen der Grenze auf 1000 zufällig ausgewählte beschränkt. Die Bestimmung der Energiewerte aller $13! = 6,2 \cdot 10^9$ ist mit heutigen Computern zum Einen kaum zu bewältigen und hätte zum Anderen, wie Testrechnung mit einer wesentlich höheren Anzahl von Zufallspermutationen gezeigt haben, die Grenze nicht wesentlich verbessert.

Auch die Berechnung der Laminatgrenze zweiter Ordnung ist zunächst numerisch zu aufwändig zur Erstellung der hier abgebildeten Plots, da die Anzahl der Funktionsaufrufe von ϕ nach Gl. 3.17 zu hoch ist: für jede der 955 Möglichkeiten, die zwölf Martensitvarianten in kompatible Zwillinge nach Gl. 3.24 und Tab. 3.3 einzusortieren, sind 720 Permutationen der Zwillingsreihenfolge zu beachten, wie zuvor bereits erläutert. Nach der Definition der Laminatgrenze zweiter Ordnung, Gl. 3.25, sind zur Energiedichteauswertung für jede dieser Permutationen zwölf ϕ -Aufrufe notwendig. Dies würde zu einer Gesamtanzahl von 8,2 Millionen Berechnungen der Funktion ϕ führen, was vom numerischen Aufwand her zu aufwändig wäre.

Um die Rechenzeit für die verzwilligte Laminatgrenze zu verringern, wurden daher für die hier dargestellten Rechnungen alle benötigten Aufrufe der Funktion ϕ , die oft in verschiedenen Permutationen der Grenze mehrfach auftreten, im Voraus berechnet und gespeichert. Hierdurch ließ sich die Anzahl der Funktionsaufrufe auf 21.504, und somit um den Faktor 380, verringern.

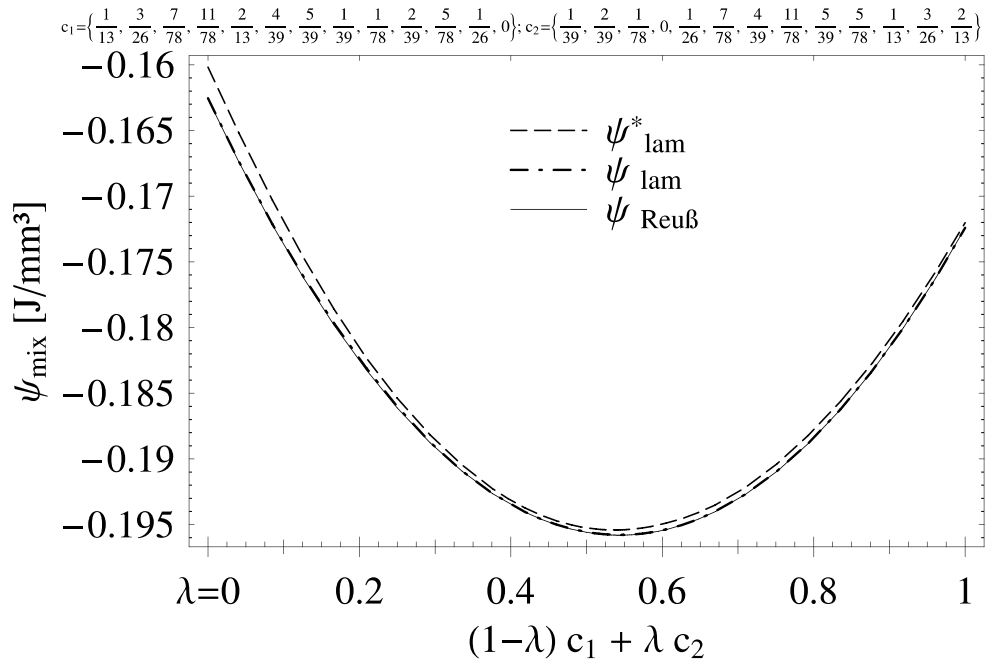


Abbildung 3.6.: Vergleich der Mischenergie-Grenzen für feste Volumenfraktionen.
 Kubisch-monoklin transformierendes Material.
 Pfad von einer Austenit-Martensit-Mischung zur anderen.

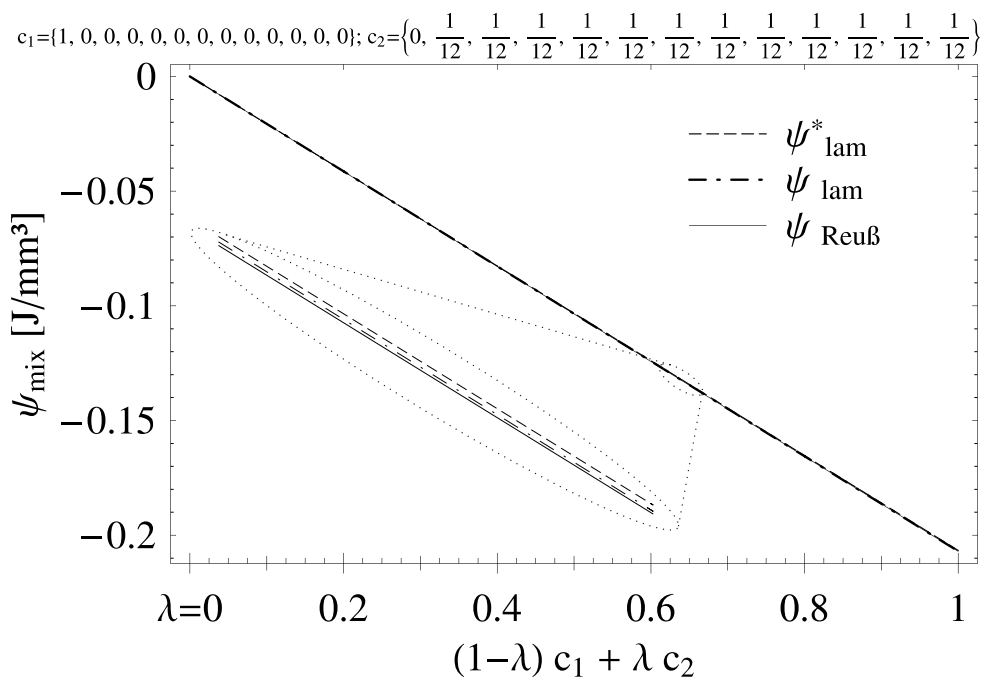


Abbildung 3.7.: Vergleich der Mischenergie-Grenzen für feste Volumenfraktionen.
 Kubisch-monoklin transformierendes Material.
 Pfad von reinem Austenit zu gleichmäßiger Mischung aller Martensite.

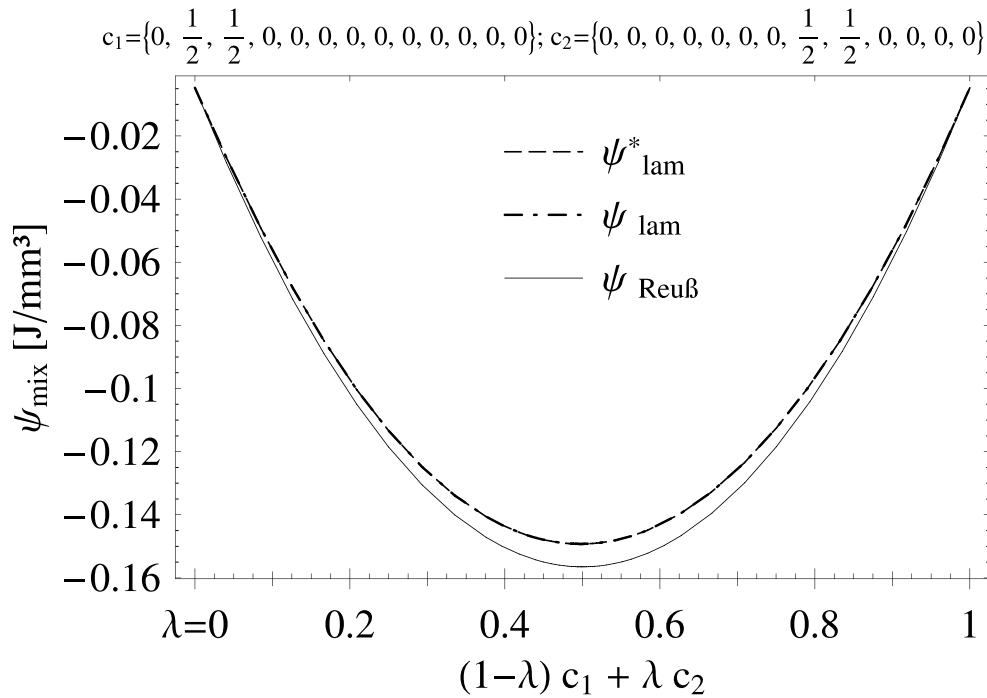


Abbildung 3.8.: Vergleich der Mischenergie-Grenzen für feste Volumenfraktionen. Kubisch-monoklin transformierendes Material. Pfad zwischen zwei untereinander nicht kompatiblen Zwillingen.

Eine ähnliche Strategie wurde auch auf die Laminatgrenze erster Ordnung angewandt. Hier lässt sich so die Anzahl der ϕ -Aufrufe von $(n+1)! \cdot n$ auf $2^{(n+1)} \cdot (n+1)$ verringern, was für dreizehn-variante Materialien eine Verringerung um den Faktor 700 bedeutet.

Als letztes Beispiel für die Mischenergie bei festen Volumenfraktionen zeigt Abb. 3.8 die Werte der Grenzen zwischen zwei untereinander nicht kompatiblen Zwillingen. Dabei handelt es sich um den für die Laminatgrenze zweiter Ordnung ungünstigsten Fall, da hier nur eine einzige Konfiguration der vorhandenen Martensitvarianten zu Zwillingen möglich ist. Aus diesem Grund verliert hier die verzwilligte Laminatgrenze ihre Qualitätsvorteile gegenüber der einfachen Laminatgrenze und ergibt, bis auf kleine numerische Abweichungen, die gleichen Werte. Die maximale Abweichung zwischen Laminat- und Reuß-Grenze liegt in diesem Beispiel bei 5,3 Prozent.

Hierzu sei noch erwähnt, dass es sich bei dem in Abb. 3.8 gezeigten Pfad um ein rein akademisches Beispiel handelt, mit dem der ungünstigste Fall für die verzwilligte Laminatgrenze getestet werden sollte. In realen Materialien wäre eine Situation mit so ungünstiger Kompatibilität energetisch kaum zu stabilisieren.

Zusammenfassend lässt sich sagen, dass die Laminatgrenze zweiter Ordnung zum Einen der zuvor bekannten oberen Grenze basierend auf Laminaten erster Ordnung qualitativ weit überlegen ist. Des Weiteren hat sich gezeigt, dass die Reußgrenze trotz der recht groben Vereinfachung durch die Vernachlässigung der Kompatibilitätsbedingungen die Energie von vielvarianten Formgedächtnislegierungen recht exakt abschätzt. Außerdem scheint die für die verzwilligte Laminatgrenze angenommene Mikrostruktur dem tatsächlichen Energieminimum recht nahe zu kommen, da ansonsten keine so gute Übereinstimmung zwischen oberen und unteren Grenzen hätte erreicht werden können.

Die in Abschnitt 3.1.2 angesprochene \mathbb{H} -Maß Grenze liegt, wie dort bereits erläutert, stets zwischen der Reußgrenze und der tatsächlichen Energiedichte. Da sich jedoch durch den Vergleich mit den oberen Laminatgrenzen gezeigt hat, dass die Reußgrenze die Energiedichte bereits in überraschend guter Qualität annähert, kann auf die numerisch weit aufwändigere Implementierung der \mathbb{H} -Maß Grenze verzichtet werden.

Die Beispiele in Abb. 3.4 bis 3.8 haben des Weiteren gezeigt, dass die tatsächliche Energiedichte n -varianter Formgedächtnismaterialien weit niedriger liegt als der von der Taylor-Grenze oder der unrelaxierten Energie vorausgesagte Wert 0. Daraus lässt sich insbesondere folgern, dass die auf der Annahme konstanter Spannungen basierende Reußgrenze zur Beschreibung des Materialverhaltens wesentlich besser geeignet ist als die Taylor-Grenze, welche von konstanten Dehnungen in der Mikrostruktur ausgeht.

3.3. Vollständige Relaxierung und energieminimierende Volumenanteile

Im vorangegangenen Kapitel hat sich gezeigt, dass sowohl die Reuß- als auch die verzwilligte Laminatgrenze die Energiedichte von Formgedächtnislegierungen mit geringer Abweichung beschreiben. Hierbei wurde zunächst von gegebenen Volumenfraktionen der verschiedenen Varianten ausgegangen. Technisch ist es aber nicht möglich, die Volumenanteile vorzugeben; diese entwickeln sich vielmehr als Konsequenz der mechanischen und thermischen Last, welche auf das Material wirkt.

Daher wird in diesem Kapitel untersucht, welche Phasenanteile die jeweiligen Grenzen für gegebene Lastsituationen als energieoptimal voraussagen. Hierbei wird auf die Betrachtung dissipativer Effekte, die insbesondere auch für das experimentell vielfach zu beobachtende hysteretische Verhalten von Formgedächtnislegierungen verantwortlich sind, zunächst verzichtet. Die Einführung eines Dissipationsansatzes würde unter anderem bewirken, dass Oszillationen zwischen verschiedenen Varianten sowie sprunghafte Entwicklungen der Volumenanteile verhindert würden. Es sind aber gerade diese Aspekte, die auf deutliche Unterschiede zwischen den zuvor eingeführten Abschätzungen der Energiedichte hinweisen könnten.

Im Folgenden sollen Strategien zur globalen Optimierung der unteren Reuß- sowie der oberen Laminatgrenze zweiter Ordnung vorgestellt und deren Ergebnisse diskutiert werden. Die hier dargestellten Ergebnisse wurden erstmalig in Heinen and Hackl (2007) präsentiert.

3.3.1. Globale Optimierung, Reuß-Grenze

Die globale Optimierung der Reuß-Grenze ist aufgrund ihrer analytisch direkt zugänglichen Form mit Standardverfahren möglich. Für die energieminimierenden Volumenfraktionen gilt

$$\nabla_{\mathbf{c}} Q\Psi_{\text{Reuß}}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c}) + \sum_{k=0}^n \gamma_k \nabla_{\mathbf{c}} g_k(\mathbf{c}) = 0, \quad (3.31)$$

wobei die hier eingeführte Abkürzung $Q\Psi_{\text{Reu\ss}}$ für die Energiedichte nach Gl. (3.6) unter Verwendung der Reu\ss-Grenze für die Mischenergie nach Gl. (3.10) steht. Die zu Gl. (3.31) gehörigen Kuhn-Tucker-Bedingungen lauten

$$\gamma_k \geq 0, \quad k = 0, \dots, n \quad (3.32)$$

$$g_0(\mathbf{c}) = -1 + \sum_{j=1}^n c_j \leq 0 \quad (3.33)$$

$$g_k(\mathbf{c}) = -c_k \leq 0, \quad k = 1, \dots, n. \quad (3.34)$$

$$\gamma_k \cdot g_k(\mathbf{c}) = 0, \quad k = 0, \dots, n, \quad \text{keine Summation,} \quad (3.35)$$

wobei der Volumenanteil der Austenitfraktion indirekt aus $c_0 = 1 - \sum_{j=1}^n c_j$ bestimmt wird. Dies führt zu einer Reduktion der Anzahl unabhängiger Variablen auf die n Martensitanteile, während gleichzeitig die Massenerhaltung durch diesen Ansatz identisch erfüllt wird und somit nicht mehr als Nebenbedingung mitzuführen ist. Die verbleibenden Nebenbedingungen (3.32) - (3.35) gewährleisten die Nichtnegativität der Volumenanteile. Diese vier Ungleichungen lassen sich wie folgt zu einer Gleichung zusammenfassen:

$$\kappa_j = \sqrt{g_j^2 + \gamma_j^2} + g_j - \gamma_j = 0, \quad j = 0, \dots, n. \quad (3.36)$$

Wie man leicht erkennt, gilt Gl. 3.36 dann und nur dann, wenn alle zuvor formulierten Nebenbedingungen gleichzeitig erfüllt sind. Der Vorteil der Verwendung von Gl. (3.36) an Stelle von Gln. (3.32) - (3.35) liegt in der numerischen Implementierung des Algorithmus': an Stelle der Lösung eines Gleichungssystems mit Ungleichungen als Nebenbedingungen wird das Problem in ein größeres, aber unrestringiertes System von Gleichungen überführt. Eine genauere Beschreibung dieser Vorgehensweise ist auch in Schmidt-Baldassari (2003) zu finden.

Die Minimierung der Reu\ssgrenze erfolgt mit einem Standard-Newton-Verfahren für die n Gleichungen aus (3.31) und die $n + 1$ Gleichungen aus (3.36).

3.3.2. Globale Optimierung, Laminatgrenze zweiter Ordnung

Die Entwicklung eines geeigneten Algorithmus' zur Minimierung der verzwilligten Reu\ssgrenze ist ein weit aufwändigeres Unterfangen. Hier empfiehlt es sich, ein Abstiegsverfahren mit einem regelmäßigen Netz von Startpunkten zu verwenden. Zur Vermeidung von Oszillationen in engen Tälern wird das Verfahren um die Methode der konjugierten Gradienten erweitert.

Auf Grund der hohen Anzahl von Permutationen, die zur Auswertung der Laminatgrenze zweiter Ordnung nach Gl. (3.25) berücksichtigt werden muss, ist jede Berechnung der Energiedichte nach dieser Grenze mit einem wesentlich höheren numerischen Aufwand verbunden als im Falle der Reu\ss-Grenze. Eine ausreichende Anzahl von Startwerten für ein Abstiegsverfahren auszuwerten würde demzufolge zu einem nicht vertretbar hohen numerischen Aufwand führen.

Dies lässt sich vermeiden, indem auf ein regelmäßiges Netz von Startvektoren zurückgegriffen wird, das für jeden Lastschritt unverändert beibehalten wird. Für alle Punkte dieses

Startvektornetzes braucht die Mischenergie dann nur einmalig pro Satz von Materialdaten berechnet und gespeichert werden. Um die Energiedichte nach der Laminatgrenze zweiter Ordnung zu erhalten, muss dann für eine gegebene Dehnung nach Gl. (3.6) an den Startpunkten zur gespeicherten Mischenergie lediglich der in direkter Form vorliegende dehnungsabhängige Term $\sum_{i=0}^n [c_i \Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{i}_i)]$ hinzuaddiert werden.

Für die Beispielrechnungen im folgenden Abschnitt wurde ein Netz von Startvektoren, die nur aus Vielfachen von 0,1 bestehen, gewählt. Als Startwerte wurden also alle möglichen Kombinationen von Phasenanteilen in 10%-Schritten berechnet, was für sieben-variantes kubisch zu orthorhombisch transformierendes Material auf eine Anzahl von 8008 Startvektoren führt. Für diejenigen vier nicht benachbarten Vektoren mit den niedrigsten zugehörigen Energiewerten wurde das Abstiegsverfahren durchgeführt.

Unter Berücksichtigung der Nebenbedingungen ist folgender Ausdruck zu minimieren:

$$Q\Psi_{\text{lam}}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c}) + \beta \left(1 - \sum_{i=0}^n c_i \right) - \sum_{i=0}^n \gamma_i c_i \rightarrow \min. \quad (3.37)$$

Hierbei ist β ein Lagrange-Parameter, der die Massenerhaltung gewährleistet, während der Kuhn-Tucker-Parameter

$$\gamma_i \begin{cases} = 0 & \text{wenn } i \in \mathcal{A}^{\text{in}} \\ \geq 0 & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.38)$$

die Nichtnegativität der Volumenanteile sicherstellt. Dabei wurde die anfängliche *aktive Menge* $\mathcal{A}^{\text{in}} = \{i \mid c_i > 0\}$ eingeführt. Hier bezieht sich *aktiv* nicht, wie in der mathematischen Literatur üblich, auf aktive Nebenbedingungen, sondern auf aktive Varianten, also solche mit echt positiven Volumenanteilen.

Durch Ableitung nach den Volumenanteilen c_i ergibt sich die notwendige Bedingung für die Existenz eines Extremums

$$q_i - \beta - \gamma_i = 0. \quad (3.39)$$

Der Gradient $\mathbf{q} = \partial Q\Psi_{\text{lam}} / \partial \mathbf{c}$ der Mischenergie bezüglich der Phasenanteile steht aufgrund der Komplexität von Gl. (3.25) nicht in analytischer Form zur Verfügung. Daher finden stattdessen numerisch berechnete Differenzenquotienten Anwendung, für deren Bestimmung lediglich die energieoptimale Permutation von ψ_{lam} bzw. $Q\Psi_{\text{lam}}$ herangezogen wird. So wird zum Einen der Berechnungsaufwand erheblich verringert, zum Anderen würde die Betrachtung unterschiedlicher Permutationen die Qualität der numerischen Ergebnisse verringern. Letzteres liegt darin begründet, dass die hier verwendeten Laminatgrenzen für geringfügige Änderungen der Volumenanteile zwischen verschiedenen Permutationen hin- und herspringen können, was zu einer geringfügigen Welligkeit der Ergebnisse führt, welche wiederum die Zuverlässigkeit numerisch bestimmter Differenzenquotienten negativ beeinflusst.

Daher werden die numerischen Gradienten wie folgt formuliert:

$$\begin{aligned} q_i &= \frac{\partial Q\Psi_{\text{lam}}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c})}{\partial c_i} \\ &\approx \frac{1}{\epsilon} \left[Q\Psi_{\text{lam}}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c} + \epsilon \mathbf{i}_i) \Big|_{\text{perm min } Q\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c})} - Q\Psi_{\text{lam}}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c}) \right] \\ &\text{für kleine } \epsilon. \end{aligned} \quad (3.40)$$

Durch Summation von (3.39) über die anfängliche aktive Menge \mathcal{A}^{in} ergibt sich der Wert des Lagrange-Parameters

$$\beta = \frac{1}{n_{\mathcal{A}^{\text{in}}}} \sum_{\mathcal{A}^{\text{in}}} q_i \quad (3.41)$$

unter Berücksichtigung von $\gamma_i = 0 \forall i \in \mathcal{A}^{\text{in}}$. Hierbei wurde $n_{\mathcal{A}^{\text{in}}}$ als Anzahl der Elemente der aktiven Menge definiert. Einsetzen von β in Gleichung (3.39) liefert damit

$$(\text{dev}_{\mathcal{A}^{\text{in}}}\mathbf{q})_i = q_i - \frac{1}{n_{\mathcal{A}^{\text{in}}}} \sum_{k \in \mathcal{A}^{\text{in}}} q_k = \begin{cases} 0 & \text{für } i \in \mathcal{A}^{\text{in}} \\ \gamma_i \geq 0 & \text{sonst} \end{cases}, \quad (3.42)$$

wobei die hier eingeführte Abkürzung $\text{dev}_{\mathcal{A}^{\text{in}}}\boldsymbol{\kappa}$ als *aktiver Deviator* eines Vektors $\boldsymbol{\kappa}$ bezeichnet wird.

Der zweite Teil von Gl. (3.42) wird als „Schalter“ verwendet, welcher entscheidet, wann eine zuvor inaktive Variante aktiv wird. Hierdurch ergibt sich die aktualisierte aktive Menge

$$\mathcal{A} = \{i \mid c_i > 0\} \cup \{i \mid c_i = 0 \wedge \text{dev}_{\mathcal{A}}q_i \leq 0\}. \quad (3.43)$$

Der aktive Deviator wird nun als Suchrichtung zur Minimierung der globalen Energiedichte verwendet. Eine Änderung der Volumenanteile wird hierbei nur für aktive Varianten zugelassen; der Deviator wird also auf die aktive Menge eingeschränkt. Im Folgenden wird diese Einschränkung durch $(\dots)_{\mathcal{A}}$ gekennzeichnet.

Es empfiehlt sich jedoch nicht, den aktiven Deviator direkt als Suchrichtung zu verwenden, da dies zu oszillierenden Suchrichtungen in engen Tälern führen könnte. Diese Problematik wird durch die Einführung der so genannten Methode der konjugierten Gradienten umgangen. Hierbei wird nach Polak and Ribière (1969) als Suchrichtung für den k ten Minimierungsschritt

$$\mathbf{d}^k = \begin{cases} -(\text{dev}_{\mathcal{A}}\mathbf{q}^k)_{\mathcal{A}} & \text{für } i = 1 \\ -(\text{dev}_{\mathcal{A}}\mathbf{q}^k)_{\mathcal{A}} + \beta^k \mathbf{d}^{k-1} & \text{sonst} \end{cases} \quad (3.44)$$

mit

$$\beta^k = \frac{[(\text{dev}_{\mathcal{A}}\mathbf{q}^k)_{\mathcal{A}} - (\text{dev}_{\mathcal{A}}\mathbf{q}^{k-1})_{\mathcal{A}}] \cdot (\text{dev}_{\mathcal{A}}\mathbf{q}^k)_{\mathcal{A}}}{(\text{dev}_{\mathcal{A}}\mathbf{q}^{k-1})_{\mathcal{A}} \cdot (\text{dev}_{\mathcal{A}}\mathbf{q}^{k-1})_{\mathcal{A}}} \quad (3.45)$$

gewählt.

Die maximale Schrittweite s_{max}^k für die Volumenanteile wird anhand derjenigen Variante gewählt, deren Volumenfraktion in Richtung des aktiven Deviators zuerst auf null zurück geht. Somit ergibt sich

$$s_{\text{max}}^k = \min_{j \in \mathcal{A}} \left\{ -\frac{c_j^k}{d_j^k} \right\}. \quad (3.46)$$

Die tatsächliche Schrittweite wird dann nach den strengen Wolfe-Powell-Bedingungen bestimmt, Powell (1970). Hierzu wird die Steigung in Richtung von \mathbf{d}^k analog zu Gl. (3.40)

numerisch unter ausschließlicher Berücksichtigung der energieminimierenden Permutation ermittelt:

$$\begin{aligned}
 g(\mathbf{c}^k, \mathbf{d}^k) &= \left. \frac{\partial Q\Psi_{\text{lam}}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c})}{\partial \mathbf{d}^k} \right|_{\mathbf{c}=\mathbf{c}^k} \\
 &\approx \frac{1}{\epsilon} \left[Q\Psi_{\text{lam}}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c}^k + \epsilon \mathbf{d}^k) \Big|_{\text{perm min } Q\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c}^k)} - Q\Psi_{\text{lam}}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c}^k) \right] \\
 &\text{für kleine } \epsilon.
 \end{aligned} \tag{3.47}$$

Die strengen Wolfe-Powell-Bedingungen führen dann zu der Menge zulässiger Schrittweiten

$$\begin{aligned}
 S^k(\mathbf{c}^k, \mathbf{d}^k) &= \left\{ s_{\text{max}}^k > s^k > 0 \mid Q\Psi_{\text{lam}}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c}^k + s^k \mathbf{d}^k) \leq Q\Psi_{\text{lam}}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c}^k) + \right. \\
 &\quad \left. \tau s^k g(\mathbf{c}^k, \mathbf{d}^k) \wedge |g(\mathbf{c}^k + s^k \mathbf{d}^k, \mathbf{d}^k)| \leq -\rho g(\mathbf{c}^k, \mathbf{d}^k) \right\}.
 \end{aligned} \tag{3.48}$$

Hierbei gewährleistet die erste Bedingung, dass durch Wahl einer Schrittweite aus S^k eine gewisse Mindestverringerung der Energie erreicht wird. Die zweite Bedingung stellt sicher, dass die Lösung ausreichend nah an einem stationären Punkt von $Q\Psi_{\text{lam}}(\mathbf{c}^k)$ in Richtung von \mathbf{d}^k liegt. Die Parameter $0 < \tau < 1/2$ und $\tau \leq \rho < 1$ werden zur Regulierung der Schärfe dieser Bedingungen verwendet. Details der algorithmischen Umsetzung der Wolfe-Powell Bedingungen sind in Geiger and Kanzow (1999) zu finden.

Die sich ergebenden Phasenanteile \mathbf{c}^{k+1} werden als Lösung des Minimierungsproblems ausgehend von einem bestimmten Startvektor akzeptiert, wenn die Norm des neuen aktiven Deviators $(\text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{q}^{k+1})_{\mathcal{A}}$ eine gewisse Toleranz unterschreitet. Die niedrigste von den verschiedenen Startpunkten aus erreichte Energie wird schließlich als globales Minimum angenommen.

Der oben erläuterte Algorithmus ist in Tab. 3.4 zusammengefasst.

3.3.3. Vergleich der Grenzen und energieoptimale Volumenanteile

Im vorherigen Kapitel wurde bereits festgestellt, dass sich obere und untere Grenze für die Mischenergie nur um wenige Prozent voneinander unterscheiden. Nun soll mit Hilfe der in diesem Kapitel vorgestellten Algorithmen untersucht werden, inwiefern sich beide Grenzen auch bezüglich der von ihnen vorhergesagten energieminimierenden Volumenanteilen entsprechen.

Hierzu werden diese Volumenanteile sowie die zugehörigen Energie- und Spannungswerte für verschiedene Lastpfade mit Reuß- und Laminatgrenze zweiter Ordnung berechnet. Dabei wird davon ausgegangen, dass die chemische Energie der Austenitphase gleich groß oder geringfügig kleiner als die des Martensits ist. Dies entspricht einem Experiment kurz oberhalb der Martensitstarttemperatur, bei der auch die hier verwendeten Materialdaten von Sedláček et al. (2005) gemessen wurden, die in Anhang B.2 angegeben sind. Für diesen Temperaturbereich, in dem beim Abkühlen die temperaturinduzierte Transformation unmittelbar

Einmalig pro Satz von Materialdaten: Mischenergiewerte $w_{\text{lam}}(\mathbf{c})$ für das Netz von Startvektoren berechnen. $\left\{ \frac{1}{10} (c_1, c_2, \dots, c_n) \mid c_1, c_2, \dots, c_n \in \mathbb{N}^0 \wedge c_1 + c_2 + \dots + c_n = 10 \right\}$
$Q\Psi_{\text{lam}}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c}) = \sum_{j=1}^n [c_j W(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{i}_j)] + w_{\text{lam}}(\mathbf{c})$ für das Startvektornetz auswerten.
Startvektoren mit niedrigsten Energiewerten auswählen.
Für jeden Startvektor:
Berechnung der anfänglichen aktiven Menge $\mathcal{A}^{\text{in}} = \{i \mid c_i > 0\}$
Berechnung der numerischen Gradienten \mathbf{q} nach Gl. (3.40)
Berechnung des <i>aktiven Deviators</i> $\text{dev}_{\mathcal{A}^{\text{in}}}\mathbf{q} = \mathbf{q} - \frac{1}{n_{\mathcal{A}^{\text{in}}}} \sum_{\mathcal{A}^{\text{in}}} q_i \mathbf{1}$
Update der aktiven Menge $\mathcal{A} = \{i \mid c_i > 0\} \cap \{i \mid c_i = 0 \wedge \text{dev}_{\mathcal{A}} q_i \leq 0\}$
Update des aktiven Deviators
Berechnung der Suchrichtung \mathbf{d}^k nach Gl. (3.44)
Berechnung der Steigung g^k in Richtung von \mathbf{d}^k nach Gl. (3.47)
Strenger Wolfe-Powell Algorithmus nach Geiger and Kanzow (1999) zur Bestimmung der optimalen Schrittweite s^k
Update des Phasenanteilsvektors $\mathbf{c}^{k+1} = \mathbf{c}^k + s^k \mathbf{d}^k$
Berechnung der anfänglichen aktiven Menge $\mathcal{A}^{\text{in}} = \{i \mid c_i > 0\}$
Berechnung der numerischen Gradienten \mathbf{q} nach Gl. (3.40)
Berechnung des <i>aktiven Deviators</i> $\text{dev}_{\mathcal{A}^{\text{in}}}\mathbf{q} = \mathbf{q} - \frac{1}{n_{\mathcal{A}^{\text{in}}}} \sum_{k \in \mathcal{A}^{\text{in}}} q_k \mathbf{1}$
Update der aktiven Menge $\mathcal{A} = \{i \mid c_i > 0\} \cap \{i \mid c_i = 0 \wedge \text{dev}_{\mathcal{A}} q_i \leq 0\}$
Update des aktiven Deviators
$\text{dev}_{\mathcal{A}}\mathbf{q} > \text{Konvergenztoleranz}$
Auswahl des niedrigsten Energiewertes.

Tabelle 3.4.: Algorithmus-Zusammenfassung: globale Optimierung der Laminatgrenze zweiter Ordnung.

bevorsteht, kommt es am ehesten zu einer verformungsinduzierten Umwandlung von Austenit zu Martensit.

Als numerische Beispiele wird im Folgenden die mikrostrukturelle Entwicklung für reine Scherung, ebene Normaldehnung und kombinierte Last betrachtet.

In Abb. 3.9 ist die Evolution der Volumenanteile des Austenit- und der verschiedenen Martensitanteile für reine Scherung dargestellt. Hierbei wird von einem Experiment bei Martensitstarttemperatur ausgegangen, für welche die chemischen Energien von Austenit und Martensit gleich groß sind. Die von den verschiedenen Grenzen vorhergesagten Volumenanteile sind, wie den Diagrammen zu entnehmen ist, sehr ähnlich. Für beide Grenzen ergibt sich eine zweistufige Transformation: zunächst transformiert der Austenit im Bereich von 0 bis ungefähr 1,2% Last vollständig zu Martensit; im zweiten Schritt findet dann eine Umformung zwischen den unterschiedlichen Varianten des Martensits statt, bis schließlich bei ca. 5,7% Last nur noch eine einzige Martensitvariante aktiv ist.

In den von der Laminatgrenze vorhergesagten Volumenanteilen der Martensitvarianten 3 bis 6 zeigen sich Oszillationen von bis zu 4 Prozent. Diese liegen darin begründet, dass die entsprechenden Varianten für die vorgegebene Last energetisch nahezu äquivalent sind. Den Volumenanteil einer Variante zugunsten einer anderen zu erhöhen ändert den Wert der Energiedichte also nicht. Aufgrund der in Kapitel 3.3.2 bereits erläuterten Welligkeit der Laminatgrenze, die im Wechsel der energieoptimalen Permutationen begründet ist, ist eine genauere Optimierung dieser Grenze bezüglich der Volumenfraktionen nicht möglich.

Die Berücksichtigung eines Dissipationsansatzes würde die Oszillationen der Volumenanteile „herausdämpfen“; allerdings ist das Hauptaugenmerk dieses Kapitels der Vergleich der mathematischen Eigenschaften der verschiedenen Grenzen, die ohne Berücksichtigung dissipativer Effekte deutlicher zum Vorschein kommen.

Um die Unterschiede in der Energie besonders für niedrige Lastfaktoren aufzuzeigen, ist in Abb. 3.10 die Quadratwurzel der von beiden Grenzen ermittelten Energiedichten dargestellt. Zusätzlich ist auch die unrelaxierte Energiedichte in der Graphik verzeichnet, um zu verdeutlichen, wie viel Energie das Material durch Ausbildung von Mikrostrukturen einspart.

Die Ergebnisse für beide Grenzen der quasikonvexen Energie unterscheiden sich geringfügig im Bereich kleiner vorgegebener Dehnungen; für Lastfaktoren oberhalb von 1,3% bleibt die Differenz stets unter 1,5%.

Aus diesem Grund zeigt Abb. 3.11 den Bereich geringer Last in Vergrößerung. In dieser Graphik ist zusätzlich ein Vergleich der Werte beider Grenzen dargestellt, wenn diese mit den energieminimierenden Volumenfraktionen der jeweils anderen Abschätzung berechnet werden.

Vergleicht man die Energiedichte nach der Laminatgrenze und diejenige nach der Reußgrenze mit den aus der Laminatgrenze berechneten energieminimierenden Volumenanteilen (also die dicke mit der dünnen gestrichelten Linie), stellt man fest, dass die Reußgrenze den Wert der Laminatgrenze annähernd bestätigt. Die Minimierung letzterer führt demzufolge in einen Bereich, in dem die tatsächliche Energie recht genau von oben und unten eingegrenzt werden kann.

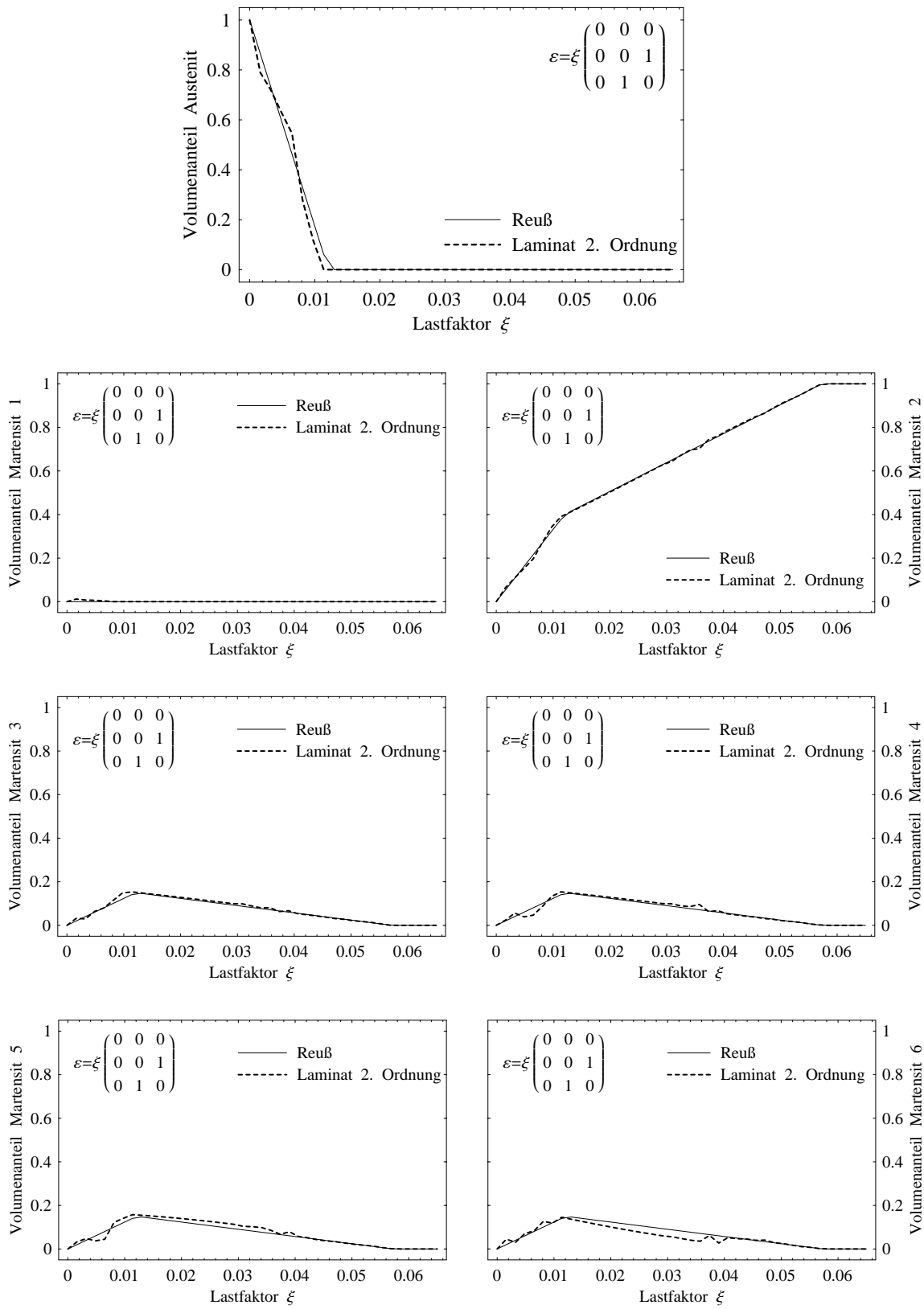


Abbildung 3.9.: Energieminimierende Volumenanteile für reine Scherung.

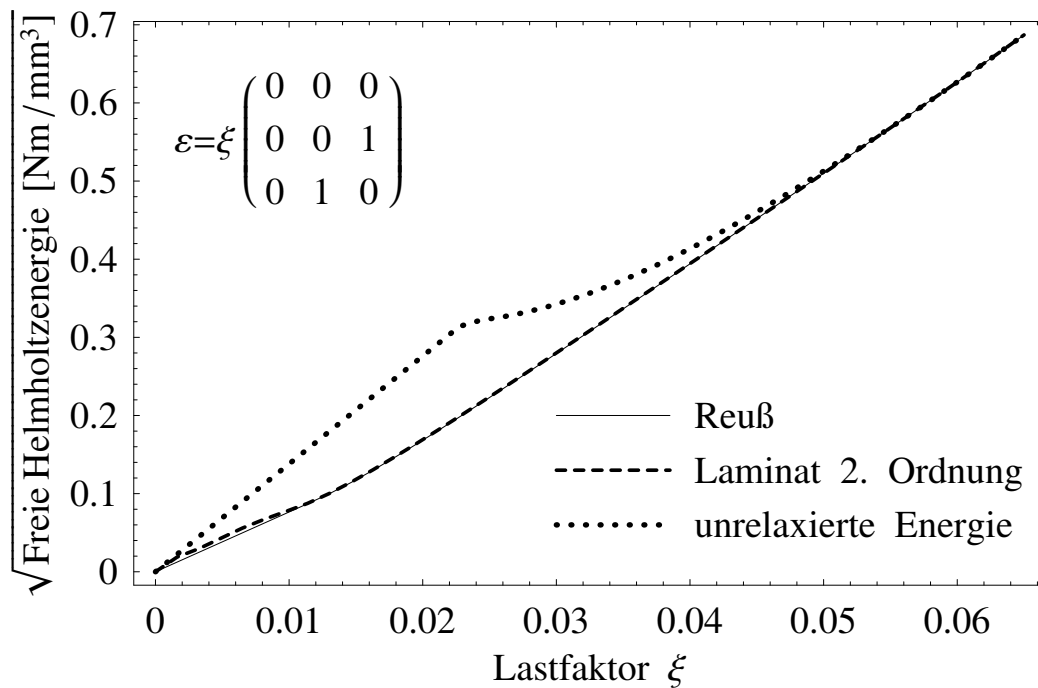


Abbildung 3.10.: Energiedichte nach Reuß- und Laminatgrenze zweiter Ordnung für reine Scherung im Vergleich zu unrelaxierter Energiedichte.

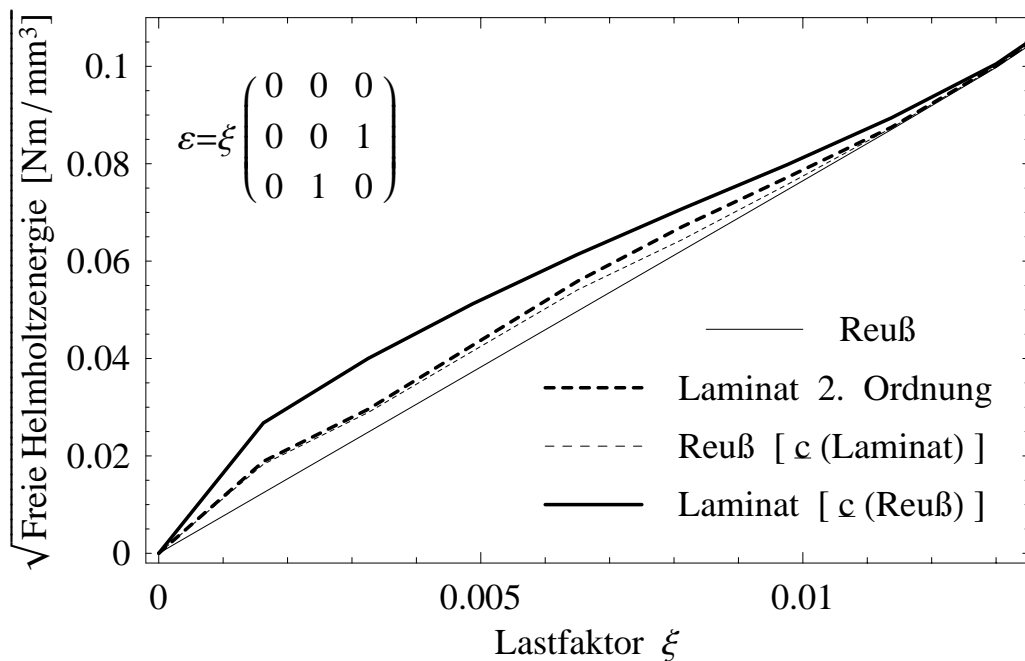


Abbildung 3.11.: Energiedichte nach Reuß- / Laminatgrenze, Volumenanteile aus Reuß- / Laminatgrenze, reine Scherung.

kehrt man diesen Vergleich um, wertet also die Laminatgrenze mit den die Reußgrenze minimierenden Volumenanteilen aus, erhält man eine größere Abweichung. Dies wird beim Vergleich der dünnen und der dicken durchgezogenen Linie deutlich. Unter der Annahme, dass die Laminatgrenze zweiter Ordnung der tatsächlichen Energie nahe kommt, führt die Optimierung der Reußgrenze demzufolge auf nicht ganz korrekte energieminimierende Volumenanteile. Diese Abweichung ist jedoch relativ gering und könnte auch auf die leichte Welligkeit der Laminatgrenze zurückzuführen sein.

Zum weiteren Vergleich beider Grenzen wird auch die von ihnen vorhergesagte Spannungs-Dehnungsbeziehung berechnet. Mit $\mathbf{c}^* = \operatorname{argmin} Q\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c})$ ergibt sich die Spannung zu

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\sigma}(\boldsymbol{\varepsilon}) &= \left. \frac{\partial Q\Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c})}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \right|_{\mathbf{c}=\mathbf{c}^*} \\ &= \left. \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{\varepsilon}} \left(\sum_{j=1}^n [c_j \Psi(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{i}_j)] + w_{\text{mix}}(\mathbf{c}) \right) \right|_{\mathbf{c}=\mathbf{c}^*} \\ &= \sum_{j=1}^n c_j^* \mathbb{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\eta}_j)\end{aligned}$$

und ist somit nicht von der Mischenergie und demzufolge auch nicht direkt von der verwendeten Grenze zur Abschätzung ebendieser abhängig. Eine indirekte Abhängigkeit entsteht jedoch dadurch, dass sich, wie oben gezeigt, die energieminimierenden Volumenanteile zwischen verschiedenen Grenzen unterscheiden können.

Die Spannung, die sich für reine Scherung ergibt, ist in Abb. 3.12 dargestellt. Wie anhand der vorherigen Abbildungen zu vermuten war, sind die von beiden Grenzen berechneten Spannungen recht ähnlich.

Als zweites Beispiel wird eine ebene Normaldehnung in der x - y -Ebene angenommen, wobei die chemische Energie des Martensits 10 Nm/mm^3 über der des Austenits liege. Dies entspricht einem Experiment etwas oberhalb der Martensitstarttemperatur. Die aus beiden Grenzen resultierenden energieminimierenden Volumenanteile sind in Abb. 3.13 dargestellt. Die Ergebnisse weisen ähnliche Oszillationen wie im vorigen Beispiel auf und entsprechen einander ansonsten recht genau.

Auf Grund des Unterschiedes in den chemischen Energien beginnt die Transformation erst nach einer gewissen Vorverformung des Materials. Da die erste und zweite Martensitvariante später aktiv werden als die übrigen und da ihr Volumenanteil verringert wird, sobald der Austenit vollständig transformiert hat, handelt es sich in diesem Beispiel um eine dreistufige Umwandlung.

Um die energetische Äquivalenz der oszillierenden Varianten aufzuzeigen, ist in Abb. 3.14 erneut die mit beiden Grenzen berechnete Energiedichte dargestellt. Zusätzlich ist auch hier der Vergleich der beiden Grenzen für die energieminimierenden Volumenfraktionen der jeweils anderen Abschätzung dargestellt. Die Abweichung zwischen Reuß- und Laminatgrenze zweiter Ordnung ist erneut recht gering. Des Weiteren zeigt sich, dass beide Grenzen für diejenigen Volumenanteile, welche die geringste Laminatenergie ergeben, nahezu zusammenfallen (dicke und dünne gestrichelte Linie). Die mit den Reuß-optimalen Anteilen be-

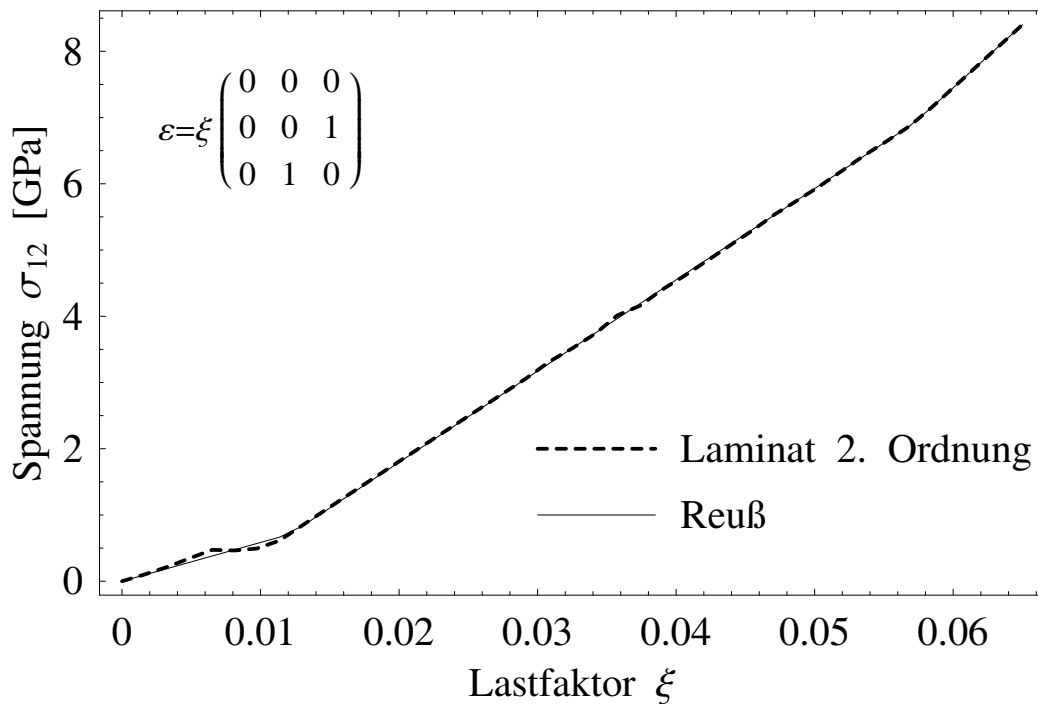


Abbildung 3.12.: Spannung nach Reuß- / Laminatgrenze, reine Scherung.

rechneten Energien (dicke und dünne durchgezogene Linie) unterscheiden sich erneut etwas stärker voneinander.

Der sich für dieses Beispiel ergebendes Spannungsverlauf ist in Abb. 3.15 dargestellt. Die Oszillationen in den Volumenanteilen beeinflussen den Spannungsverlauf stärker als in Abb. 3.12 für reine Scherung zu beobachten war. Die Spannungssprünge sind hierbei durch abrupte Änderung der energieminimierenden Variantenpermutationen bedingt. Eine Bestrafung derartiger abrupter mikrostruktureller Änderung im Rahmen eines Dissipationsansatzes würde die Oszillationen „herausdämpfen“.

Als drittes und letztes Beispiel soll eine gemischte Normal- und Scherdehnung betrachtet werden. Hierbei wird der Unterschied in der chemischen Energie auf 50 Nm/mm^3 festgesetzt, ist also etwas höher als in den zuvor gezeigten Beispielen. Die energieminimierenden Volumenanteile sind in Abb. 3.16 dargestellt und weisen erneut eine recht gute Übereinstimmung zwischen beiden Grenzen auf.

Die Transformation setzt in den Graphiken von Abb. 3.16 aufgrund der höheren Differenz der chemischen Energie erwartungsgemäß deutlich später ein und findet dann in drei Stufen statt: zunächst bildet sich langsam die sechste Martensitvariante auf Kosten des Austenitanteils im Bereich von ungefähr zwei bis drei Prozent Belastung. Im zweiten Schritt wachsen bis zu einem Lastfaktor von circa vier Prozent die Volumenanteile aller Martensite an, wobei die Steigung im Falle der sechsten Variante am größten ist.

Oberhalb von vier Prozent Last bilden sich schließlich die ersten fünf Martensitvarianten wieder zurück. Diese letzte Stufe der Transformation würde der Reuß-Grenze zu Folge bis zu einem Lastfaktor von 33% weitergehen. Da derart hohe Lasten aber auf Grund zuvor einsetzender plastischer Effekte physikalisch nicht erreichbar sind, werden sie hier nicht

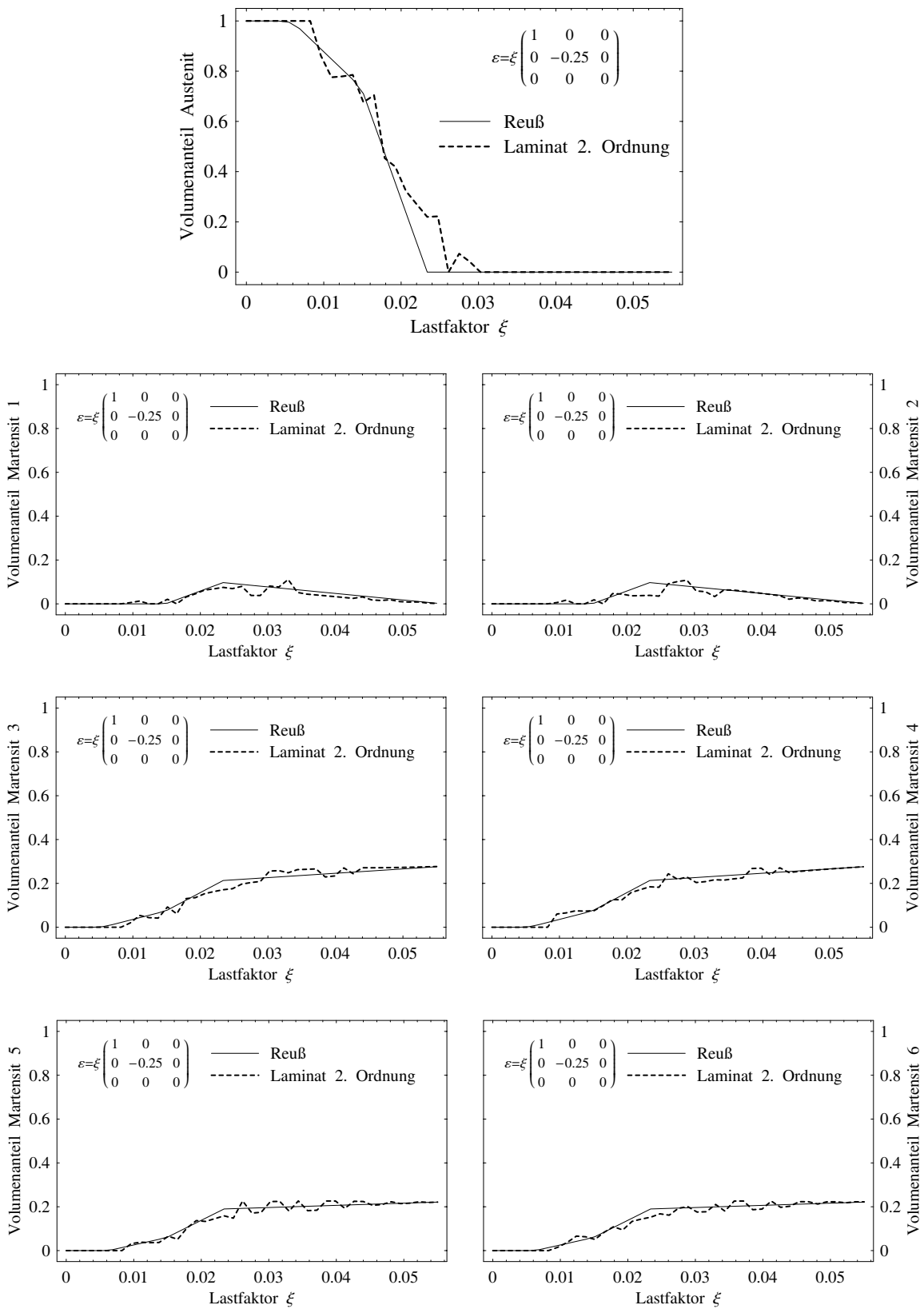


Abbildung 3.13.: Energiminimierende Volumenanteile für ebene Dehnung.

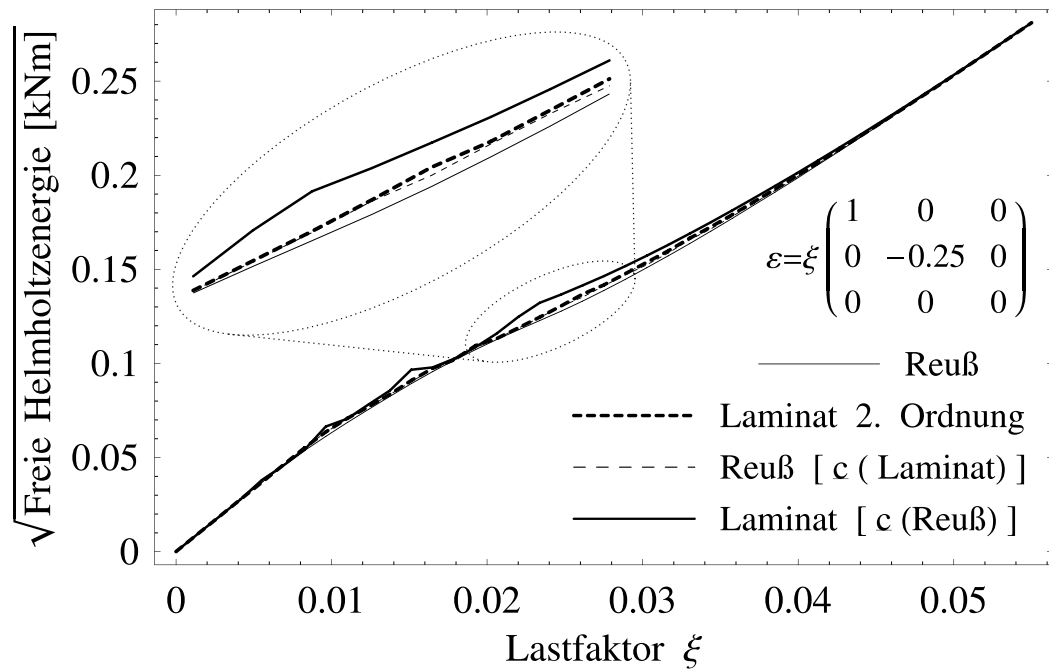


Abbildung 3.14.: Energiedichte nach Reuß- / Laminatgrenze, Volumenanteile aus Reuß- / Laminatgrenze, ebene Dehnung.

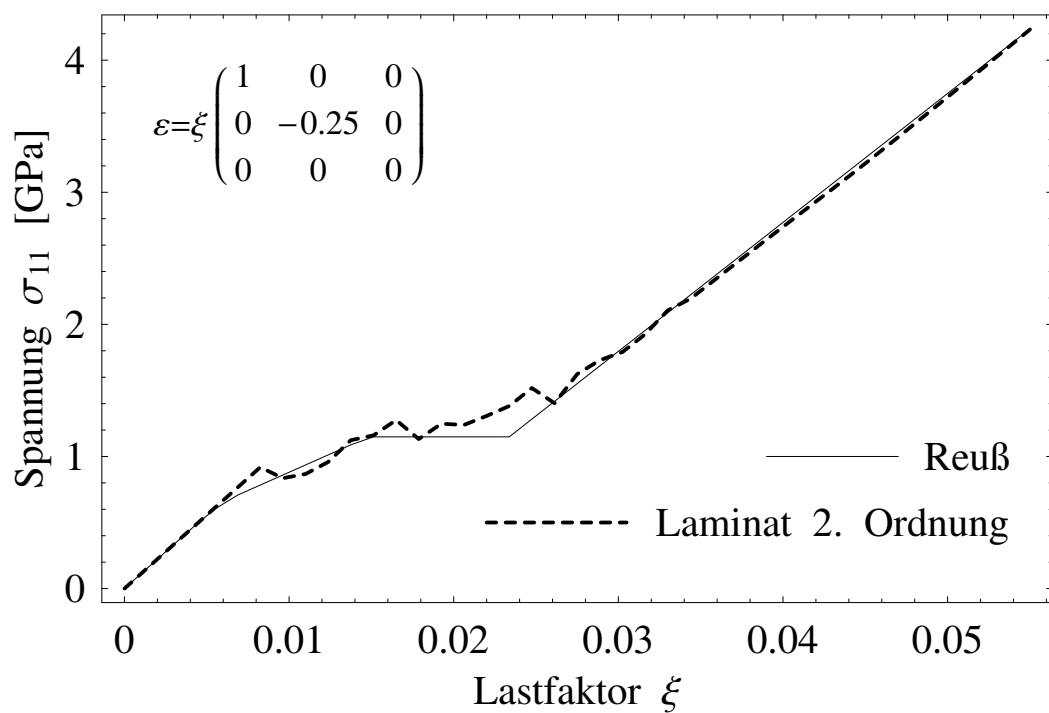


Abbildung 3.15.: Spannung nach Reuß- / Laminatgrenze, ebene Dehnung.

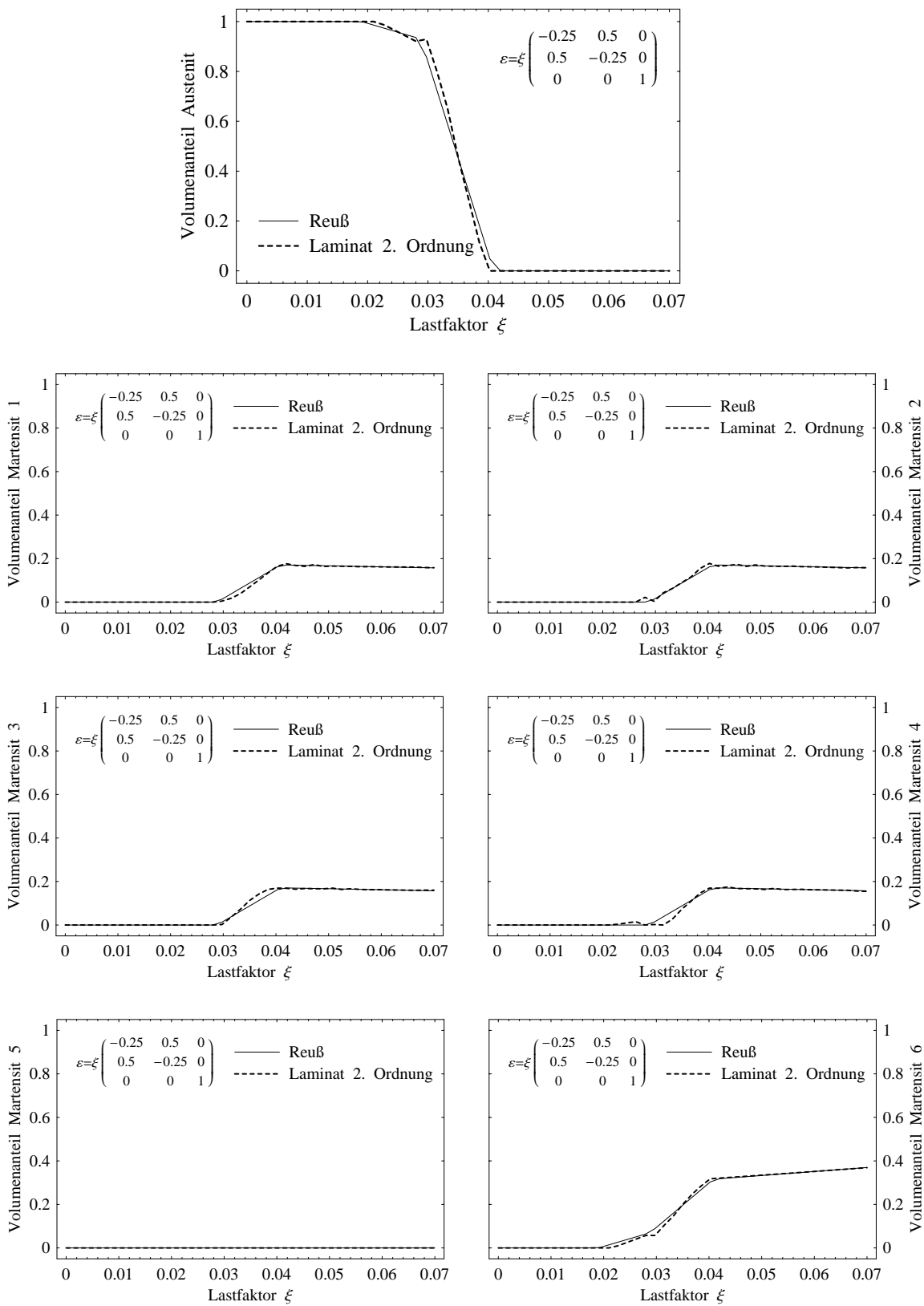


Abbildung 3.16.: Energiminimierende Volumenanteile für kombinierte Last.

weiter betrachtet.

Die energetische Äquivalenz der leicht voneinander abweichenden energieoptimierenden Volumenfraktionen für die Reuß- und die Laminatgrenze zweiter Ordnung zeigt Abb. 3.17. Offensichtlich fallen beide Grenzen nahezu aufeinander. Die Energiedichten für beide Grenzen für diejenigen Volumenanteile, die die jeweils andere Grenze minimieren, ergeben ebenfalls nahezu identische Graphen. Daher kann auf die entsprechende Darstellung hier verzichtet werden.

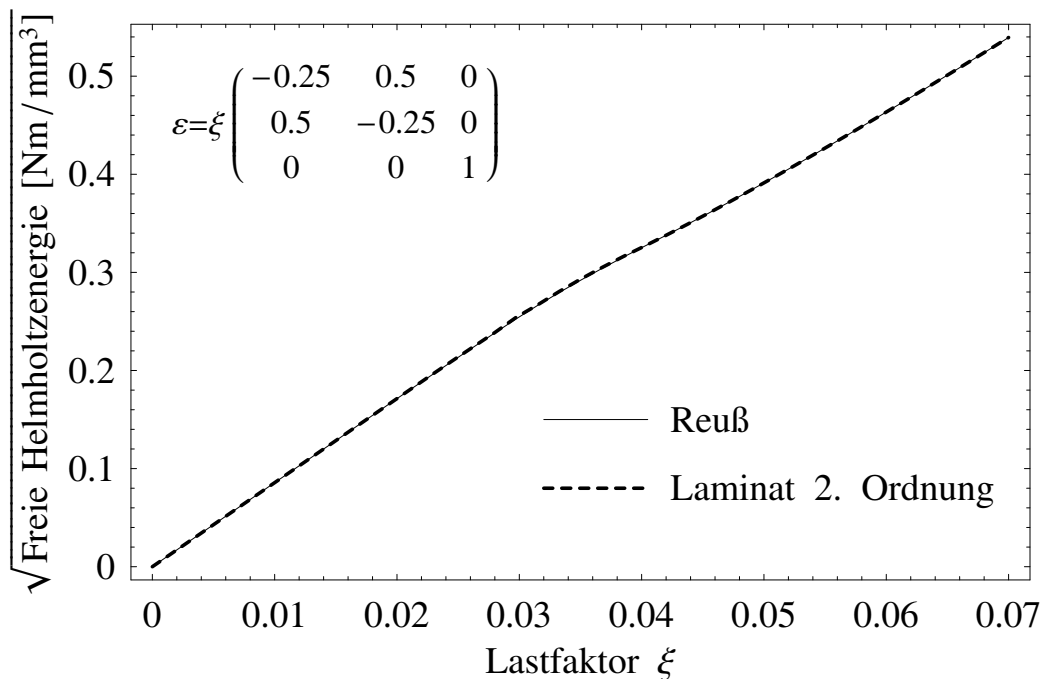


Abbildung 3.17.: Energiedichte nach Reuß- / Laminatgrenze, kombinierte Last.

Die Spannungs-Dehnungsbeziehung für diesen Lastpfad ist in Abb. 3.18 gezeigt. Diese ist für beide Abschätzungen wiederum recht ähnlich und weist im Transformationsbereich leichte Oszillationen auf.

Neben der Ähnlichkeit von Reuß- und Laminatgrenze lässt sich in Abb. 3.18 noch eine weitere Beobachtung machen: im Bereich von ungefähr 2,8 bis 4,2 % Lastaufbringung fällt die Spannung nach beiden Grenzen ab. Insbesondere im Falle der Reuß-Grenze scheint dies auf die Verletzung der in Anhang A erläuterten Konvexitätsbedingung (A.7) hinzudeuten, obwohl es sich bei dieser Grenze um eine konvexe Relaxierung handeln sollte.

Dieser scheinbare Widerspruch löst sich auf, wenn man statt der maximalen Komponente des Spannungstensors, also für diesen Lastfall σ_{33} , den Energiegradienten in Richtung des Lastpfades plottet, wie in Abb. 3.19 dargestellt.

Um das Zustandekommen eines teilweisen Rückgangs der Spannung bei fortschreitender Dehnung näher zu erläutern, werde hier zusätzlich eine von zwei Parametern abhängige

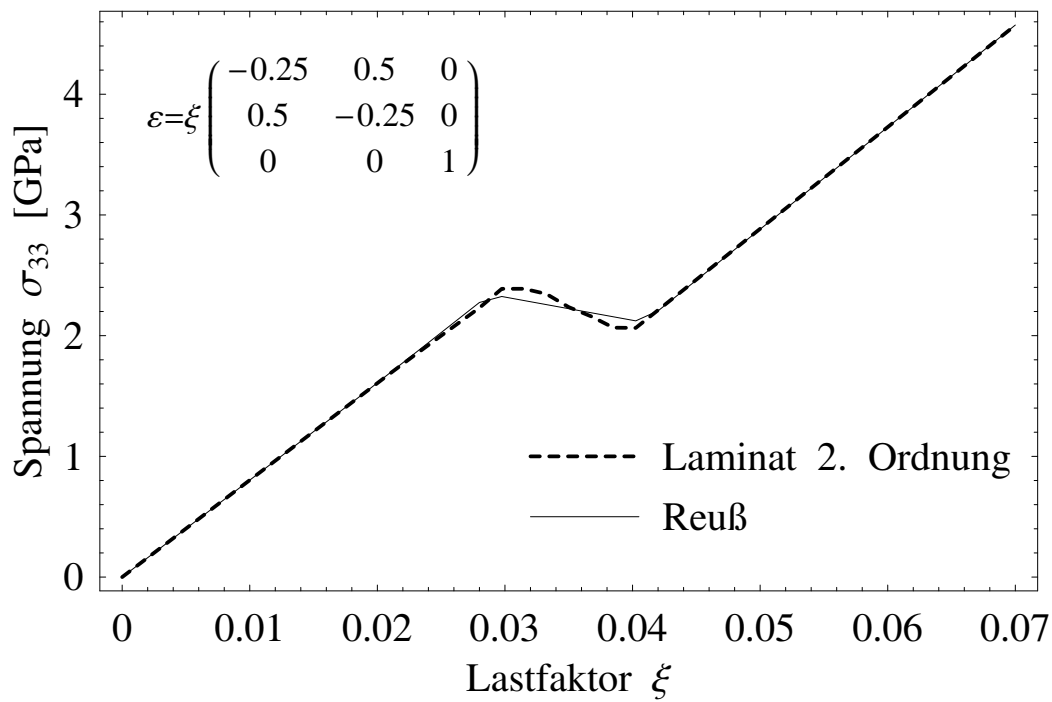


Abbildung 3.18.: Spannung nach Reu- / Laminatgrenze, kombinierte Last.

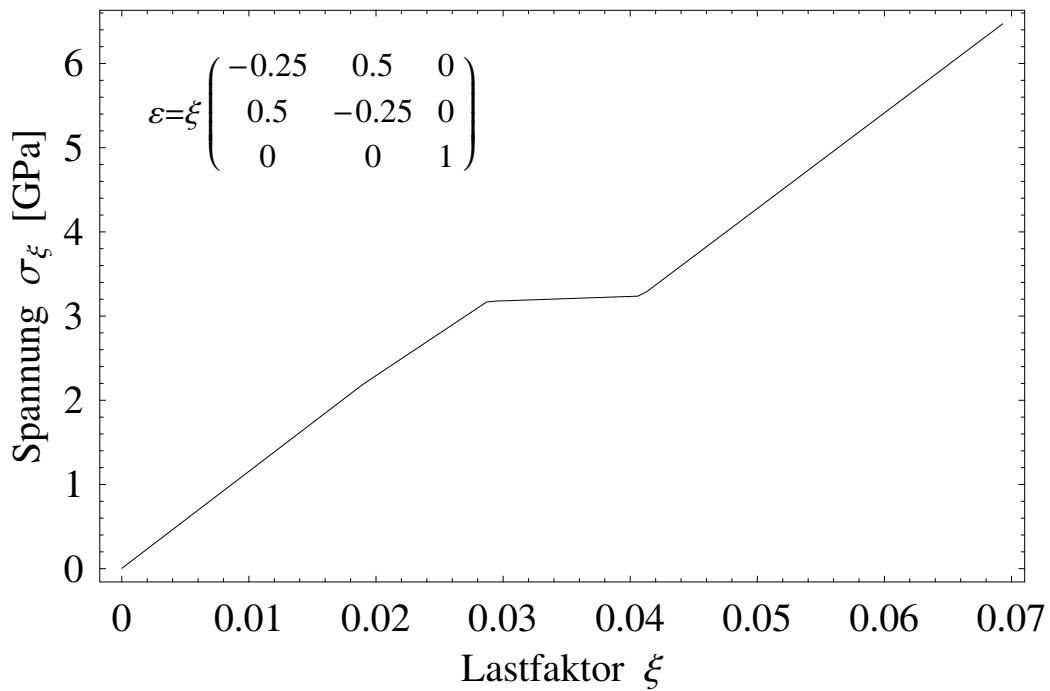


Abbildung 3.19.: Spannung nach Reugrenze in Richtung des Lastpfades, kombinierte Last.

äußere Dehnung

$$\varepsilon(\xi, \zeta) = \xi \begin{pmatrix} -0,25 & 0,5 & 0 \\ 0,5 & -0,25 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \zeta \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (3.49)$$

definiert. Die zu dieser Dehnung gehörige Energielandschaft zeigt Abb. 3.20. Es ist deutlich erkennbar, dass die Energie sowohl in ξ - als auch in ζ -Richtung monoton ansteigt. Da die Krümmung der Energie jedoch recht gering ist, kann anhand dieser Graphik noch keine eindeutige Schlussfolgerung bezüglich der Konvexität getroffen werden.

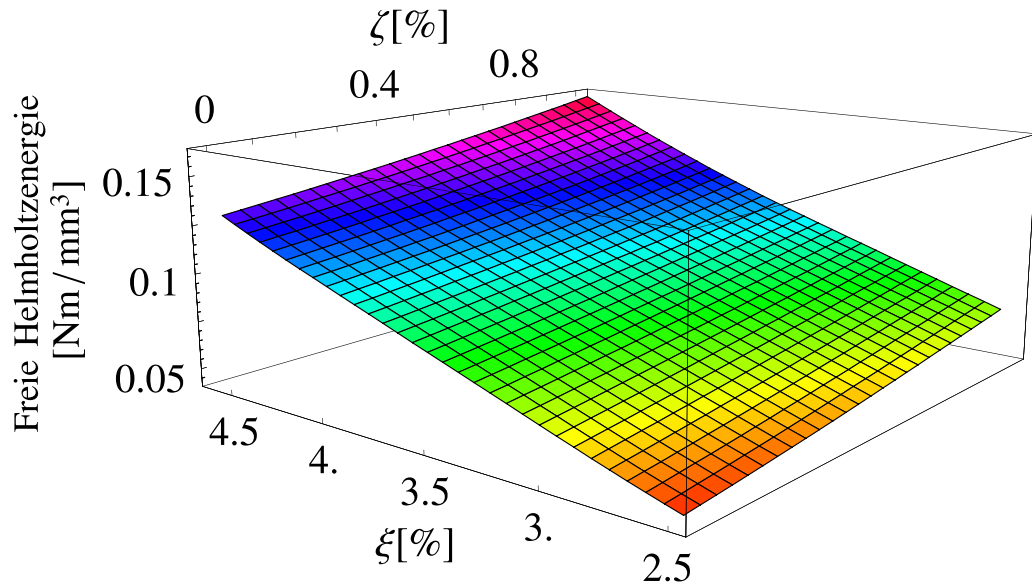


Abbildung 3.20.: Energiedichte in Abhängigkeit von ξ und ζ nach Gl. 3.49.

Aus diesem Grund sollen nun auch die Gradienten der Energie in Richtung der beiden Parameter betrachtet werden. Diese können als zwei skalare Spannungen aufgefasst werden:

$$\sigma_\xi = \frac{\partial Q\Psi(\varepsilon, \mathbf{c})}{\partial \xi} = \lim_{\Delta\xi \rightarrow 0} \frac{Q\Psi(\varepsilon(\xi + \Delta\xi, \zeta)) - Q\Psi(\varepsilon(\xi, \zeta))}{\Delta\xi} \quad (3.50)$$

und

$$\sigma_{33} = \sigma_\zeta = \frac{\partial Q\Psi(\varepsilon, \mathbf{c})}{\partial \zeta} = \lim_{\Delta\zeta \rightarrow 0} \frac{Q\Psi(\varepsilon(\xi, \zeta + \Delta\zeta)) - Q\Psi(\varepsilon(\xi, \zeta))}{\Delta\zeta}, \quad (3.51)$$

wobei σ_ζ offensichtlich der Spannung in 33-Richtung entspricht. Die Werte dieser beiden Spannungen sind in Abb. 3.21 und 3.22 graphisch dargestellt. In beiden Abbildungen ist zu erkennen, dass die jeweilige Spannung in Richtung der zugehörigen Dehnung stets monoton ansteigt. Die Konvexität der Energiedichte nach der Reiß-Grenze ist also nicht verletzt.

Die Tatsache, dass die Spannungen in Richtung eines ihnen nicht entsprechenden Pfades teils absinken, stünde nur dann im Widerspruch zur Konvexitätsbedingung, wenn in diese Richtung auch ein Abfall der Energiedichte zu verzeichnen wäre, was aber hier nicht der Fall ist.

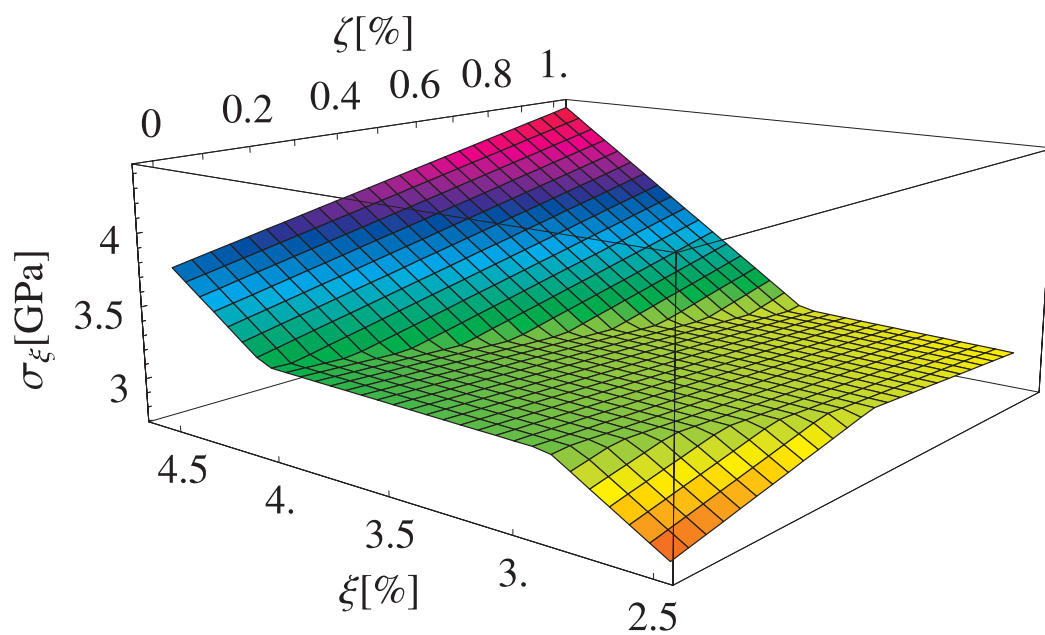


Abbildung 3.21.: Spannung in Pfadrichtung nach Gl. 3.50.

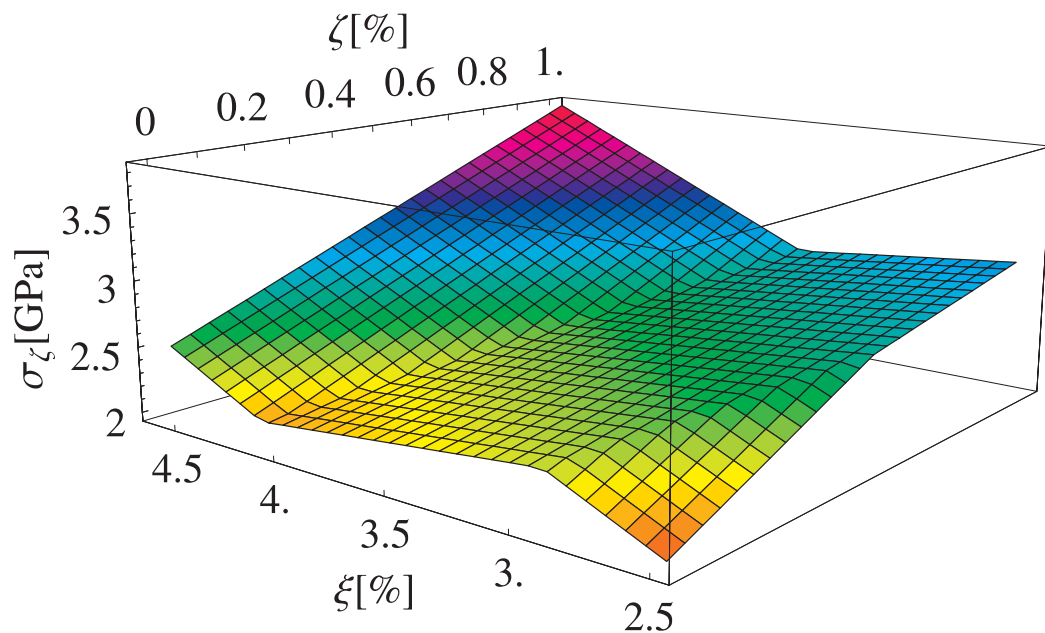


Abbildung 3.22.: Spannung in 33-Richtung nach Gl. 3.51.

Die in diesem Kapitel präsentierten numerischen Beispiele haben gezeigt, dass sich die Laminatgrenze zweiter Ordnung und die Reußgrenze nur geringfügig voneinander unterscheiden. Insbesondere die von beiden Abschätzungen berechneten Energiedichten sind einander recht ähnlich.

Betrachtet man die Abweichungen in der Genauigkeit der Materialdaten, so stellt man fest, dass diese selbst bei aufwändigen experimentellen Untersuchungen wie in Sedlák et al. (2005) Werte von zwei Prozent und mehr erreichen.

3.4. Vorhersage von Mikrostrukturparametern

Es hat sich gezeigt, dass die von der Laminatgrenze zweiter Ordnung vorhergesagte recht nah an der tatsächlichen quasikonvexen Energiedichte monokristalliner Formgedächtnismaterialien liegt. Aufgrund dieser Beobachtung kann davon ausgegangen werden, dass die Mikrostrukturen, welche die Grenze als Energieminimierer annimmt, der realen Werkstoffstruktur entsprechen. Diese Anwendungsmöglichkeit der Laminatgrenze zweiter Ordnung wurde auch in Heinen et al. (2006) näher dargelegt.

In diesem Kapitel soll nun an den zuvor berechneten Beispielen gezeigt werden, welche Mikrostrukturen von der Laminatgrenze zweiter Ordnung als energieminierend ermittelt wurden. Hierzu wird zusätzlich zum minimalen Wert der Energiedichte auch die zugehörige Permutation der Zwillingsvarianten abgespeichert. Die jeweiligen Permutationen werden durch zwei Ziffern gekennzeichnet. Die erste, welche im Fall der kubisch-orthorhombischen Materialdaten von eins bis 15 läuft, beschreibt die Einordnung der Martensitvarianten in Zwillingspaare, wie sie auf Seite 33 bereits eingeführt wurde. Die verschiedenen Möglichkeiten, die sechs Martensitvarianten paarweise zusammenzufassen bilden die Spalten in Tab. 3.5.

Die zweite Ziffer zur Charakterisierung der Permutationen läuft von eins bis sechs und beschreibt die Reihenfolge, in der die zuvor festgelegten Zwillinge in der Laminatgrenze (3.25) berücksichtigt werden. Die verschiedenen Möglichkeiten der Anordnung fester Zwillingspaarungen bilden die Zeilen in Tab. 3.5.

Die Entwicklung der Mikrostruktur für die zuvor betrachteten Lastpfade ist in Abb. 3.23 bis 3.25 dargestellt. Die Bereiche, in denen sich die energieminimierende Permutation nicht ändert, sind hierbei durch unterschiedliche Linienschattierungen gekennzeichnet. Hierbei wurden die oben bereits angesprochenen Oszillationen in den energieminimierenden Permutationen unterdrückt, indem in den entsprechenden Lastbereichen eine einzelne Permutation gewählt wurde, mit der auch die umliegenden Punkte berechnet wurden. Da hierdurch zum Teil die berechneten Volumenanteile nicht exakt zu den Permutationen passen, ergeben sich um bis zu vier Prozent höhere Werte der Mischenergie. Die jeweils gewählte Permutation ist in Klammern in den Plots angegeben, wobei in Fällen, in denen alle Permutationen die gleiche Energiedichte liefern, die Permutation „(0, 0)“ genannt wird.

Die Orientierung der Grenzflächen zwischen Austenit und den Martensitzwillingen geht aus dem Modell nicht hervor. Für die graphischen Darstellungen wird daher als Grenzflächennormale $\mathbf{n}_{AM} = 1/\sqrt{2}(1, 1, 1)$ angenommen. Die Reihenfolge und Zusammenstellung der

A	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15
1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	2	2	2	3	3	3	4	4	4	5	5	5	6	6	6
	3	3	3	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
	4	5	6	4	5	6	3	5	6	3	4	6	3	4	5
	5	4	4	5	4	4	5	3	3	4	3	3	4	3	3
2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	2	2	2	3	3	3	4	4	4	5	5	5	6	6	6
	5	4	4	5	4	4	5	3	3	4	3	3	4	3	3
	6	6	5	6	6	5	6	6	5	6	6	4	5	5	4
	3	3	3	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	3	3	3	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
	4	5	6	4	5	6	3	5	6	3	4	6	3	4	5
	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	2	2	2	3	3	3	4	4	4	5	5	5	6	6	6
	5	4	4	5	4	4	5	3	3	4	3	3	4	3	3
4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	3	3	3	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
	4	5	6	4	5	6	3	5	6	3	4	6	3	4	5
	5	4	4	5	4	4	5	3	3	4	3	3	4	3	3
	6	6	5	6	6	5	6	6	5	6	6	4	5	5	4
	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
5	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	5	4	4	5	4	4	5	3	3	4	3	3	4	3	3
	6	6	5	6	6	5	6	6	5	6	6	4	5	5	4
	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	2	2	2	3	3	3	4	4	4	5	5	5	6	6	6
	3	3	3	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	5	4	4	5	4	4	5	3	3	4	3	3	4	3	3
	6	6	5	6	6	5	6	6	5	6	6	4	5	5	4
	3	3	3	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
	4	5	6	4	5	6	3	5	6	3	4	6	3	4	5
	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	5	4	4	5	4	4	5	3	3	4	3	3	4	3	3
	6	6	5	6	6	5	6	6	5	6	6	4	5	5	4
	3	3	3	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2	2
	4	5	6	4	5	6	3	5	6	3	4	6	3	4	5
	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

Tabelle 3.5.: Benennung der Martensitpermutationen, kubisch-orthorhombisch transformierendes, 7-variantes Material.

Zwillinge wird aus der energieminimierenden Permutation abgeleitet, und die Orientierung der Grenzflächen zwischen den einzelnen Martensitvarianten wird jeweils nach der auf Seite 32 angegebenen Formel berechnet. Die Parameter, welche die energieminimierenden Permutationen beschreibenden, also Einsortierung in und Reihenfolge der Zwillinge sowie die Orientierung der entsprechenden Grenzflächen sind in Abb. 3.23 bis 3.25 für einige charakteristische Punkte graphisch dargestellt.

Für die graphische Darstellung der Mikrostrukturparameter wird für jeden Punkt \mathbf{x} im repräsentativen Volumenelement wie folgt vorgegangen, um die dort vorliegende Variante zu ermitteln:

- Berechnung des Abstandes d vom Koordinatenursprung in Projektion auf die Austenit - Martensitgrenzflächennormale:

$$d = (\mathbf{n}_{AM} \cdot \mathbf{x}) \quad \text{mod } 1. \quad (3.52)$$

Hierbei sorgt die Berechnung des Abstandes *modulo* 1 dafür, dass sich die berechnete Mikrostruktur periodisch im Abstand 1 wiederholt.

- Entscheidung, welcher Zwilling am entsprechenden Punkt vorliegt:
 - Austenit für $d \leq c_0$.
 - Erster Zwilling für $d \leq \sum_{i=0}^2 c_i$.
 - Zweiter Zwilling für $d \leq \sum_{i=0}^4 c_i$.
 - Dritter Zwilling: sonst.
- Entscheidung, welche Variante innerhalb eines Zwillings an der jeweiligen Stelle vorliegt:
 - Einführung eines Skalierfaktors e für den jeweiligen Zwilling. Da das Modell keine Aussage zu der Größenskala der Mikrostruktur macht, ist die Wahl dieses Skalierfaktors willkürlich. In den Graphiken wurde 0,03 für den ersten, 0,02 für den zweiten und 0,05 für den dritten Zwilling gewählt.
 - Berechnung der Koordinaten des Durchstoßungspunktes der Austenit - Martensitgrenzflächennormale mit der Anfangsfläche des Zwillings

$$\mathbf{x}_P = \mathbf{n}_{AM} \sum_{i=0}^z c_i \quad (3.53)$$

mit $z = 0$ für den ersten, $z = 2$ für den zweiten und $z = 4$ für den dritten Zwilling.

- Berechnung des Abstandes d_Z vom Durchstoßungspunkt zum betrachteten Punkt in Projektion auf die Austenit - Martensitgrenzflächennormale:

$$d_Z = ((\mathbf{x} - \mathbf{x}_P) \cdot \mathbf{n}_Z) \quad \text{mod } e. \quad (3.54)$$

- Erste Variante des Zwillings für $d_Z \leq e c_{Z1} / (c_{Z1} + c_{Z2})$ mit c_{Z1} bzw. c_{Z2} als Volumenanteile der ersten und zweiten Variante des Zwillings; sonst zweite Variante des Zwillings.

Nach dieser Prozedur wurden die Variantenverläufe für die Seitenflächen des Einheitswürfels an den in Abb. 3.23 bis 3.25 gekennzeichneten Punkten berechnet und durch Graustufen dargestellt. Hierbei steht jeweils schwarz für die erste Variante (Austenit) und weiß für die sechste Martensitvariante.

Im Beispiel der reinen Scherung, Abb. 3.25, wird der experimentell vielfach beobachtete Effekt deutlich, dass sich im Laufe eines Lastpfades zunächst Zwillinge bilden, die sich dann zu Gunsten einer einzelnen Variante wieder zurückbilden. Man spricht hierbei vom *Detwinning*-Effekt.

Die hier für einen Materialpunkt berechneten Mikrostrukturen könnten mittels der Finite-Elemente-Methode bei entsprechendem Rechenaufwand auch auf komplexere Bauteile übertragen werden. Mit modernen Mikroskopietechniken wäre dann eine Validierung des mikromechanischen Modells durch Vergleich mit Experimenten denkbar.

Alternativ kann, beispielsweise für einen Vergleich mit ein- oder mehrachsigen spannungsgesteuerten Versuchen, ein Algorithmus verwendet werden, um nach Dehnungstensenoren zu suchen, welche einen konkreten Spannungstensor ergeben. Dies ist allerdings numerisch recht aufwändig und führt aufgrund der hohen Nichtlinearität des Materialgesetzes auch nicht grundsätzlich zum Ziel.

In Heinen et al. (2006) wurde eine solche Rechnung durchgeführt. Für den Dehnungstensor

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \begin{pmatrix} 0,049 & 0 & 0 \\ 0 & -0,002 & 0 \\ 0 & 0 & -0,038 \end{pmatrix} \quad (3.55)$$

ergibt sich eine Spannung von

$$\boldsymbol{\sigma} = \begin{pmatrix} 110 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix} \text{ MPa}, \quad (3.56)$$

was beispielsweise mit einem einachsigen Zugversuch vergleichbar ist. Die zugehörige Mikrostruktur zeigt Abb. 3.26. Offensichtlich sind für diesen Lastfall nur zwei Martensitzwillinge aktiv. Experimentelle Untersuchungen, zu denen auch der hier simulierte einachsige Zugversuch gehört, zeigen häufig das Vorhandensein nur einiger weniger verzwilligter Varianten.

Da, wie sich in den Betrachtungen dieses Kapitels gezeigt hat, die Ungenauigkeit der energetischen Beschreibung im Rahmen derer der Materialdaten liegt, und da die Reiß-Grenze wesentlich einfacher und schneller in ihrer Berechnung ist als die Laminatgrenzen, wird diese im folgenden Kapitel für die Betrachtung polykristalliner Strukturen als einzige Abschätzung der elastischen Energie von Formgedächtnislegierungen verwendet werden.

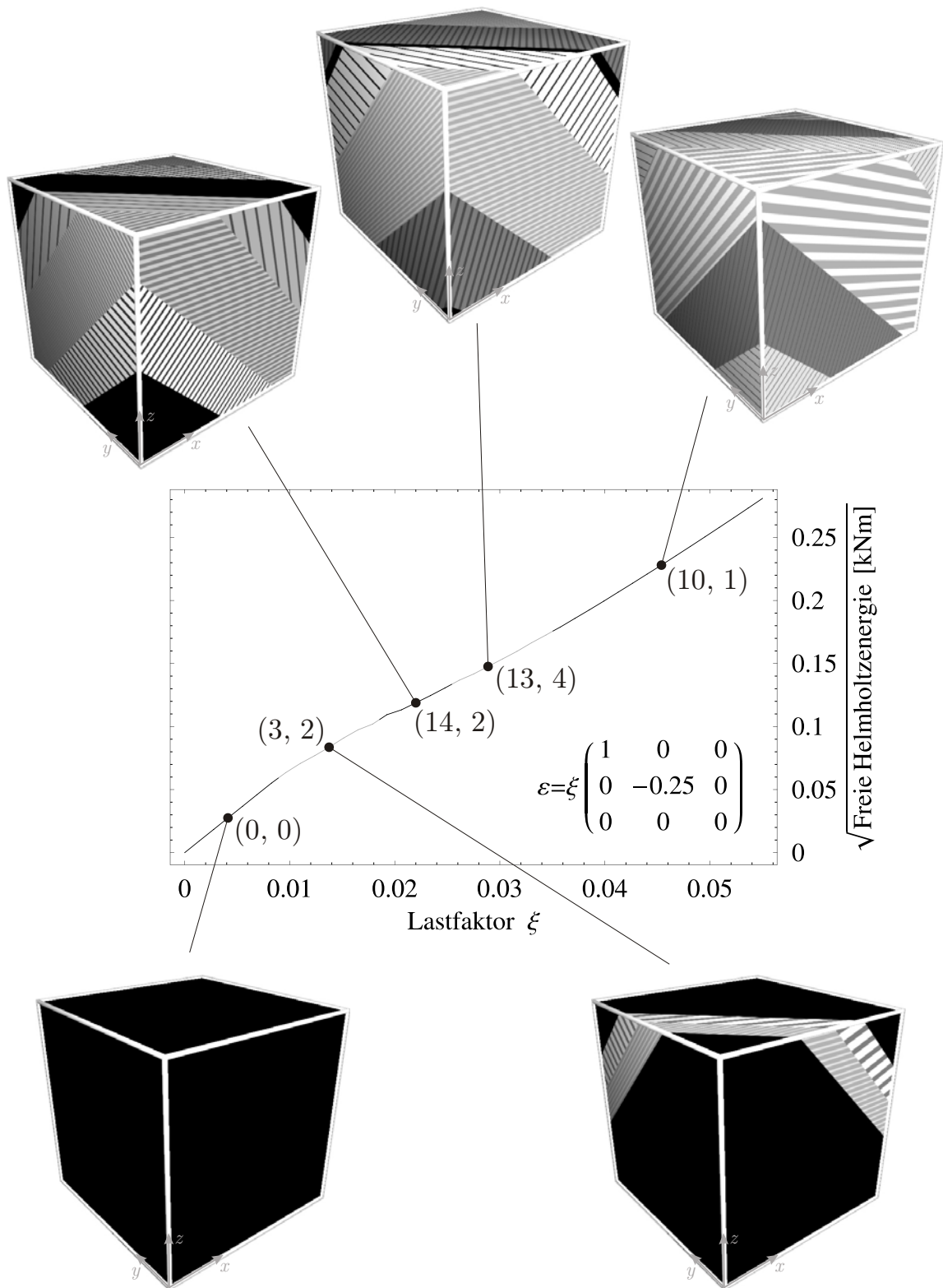


Abbildung 3.23.: Mikrostrukturentwicklung nach Laminatgrenze zweiter Ordnung, ebene Dehnung.

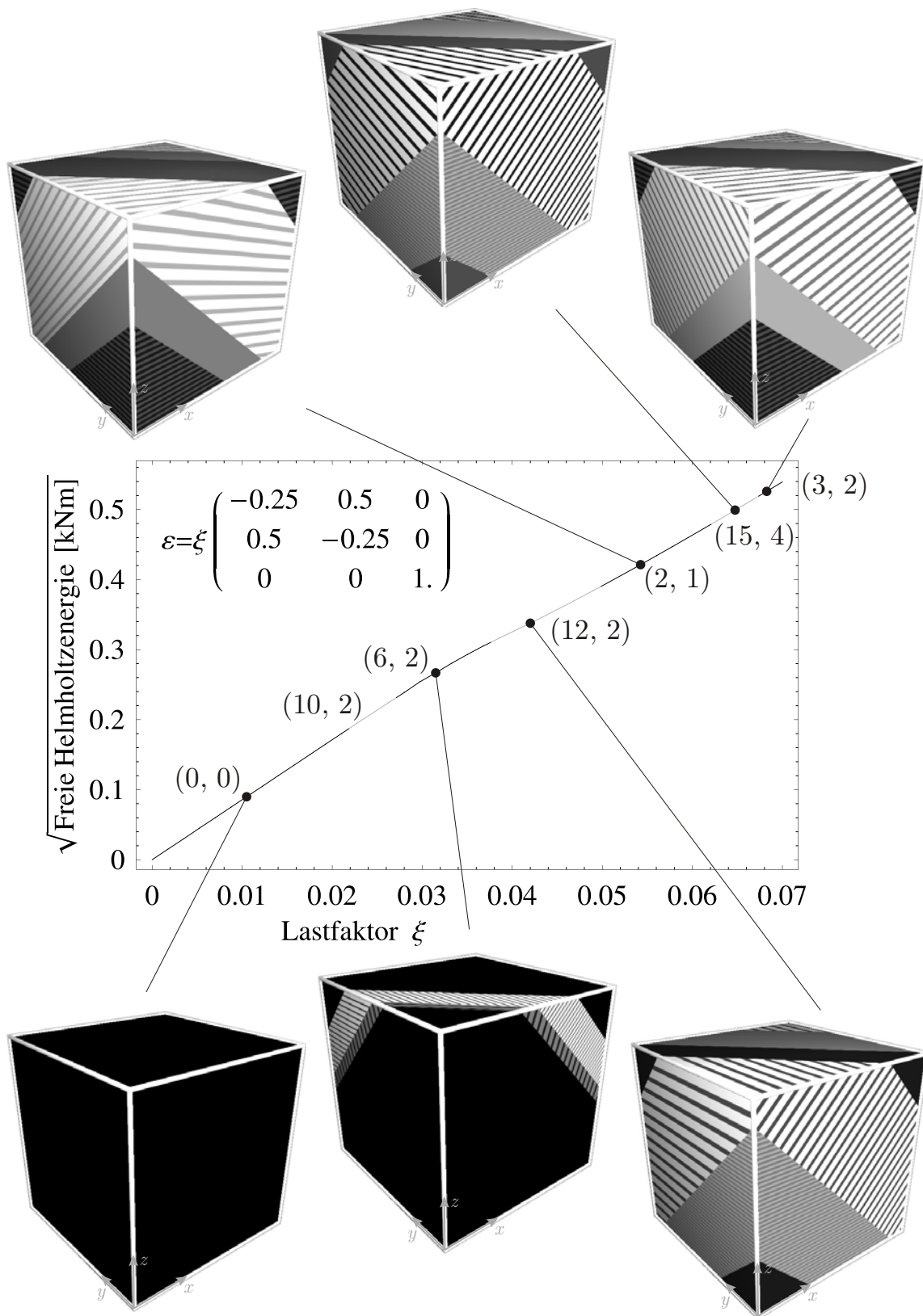


Abbildung 3.24.: Mikrostrukturentwicklung nach Laminatgrenze zweiter Ordnung, kombinierte Last.

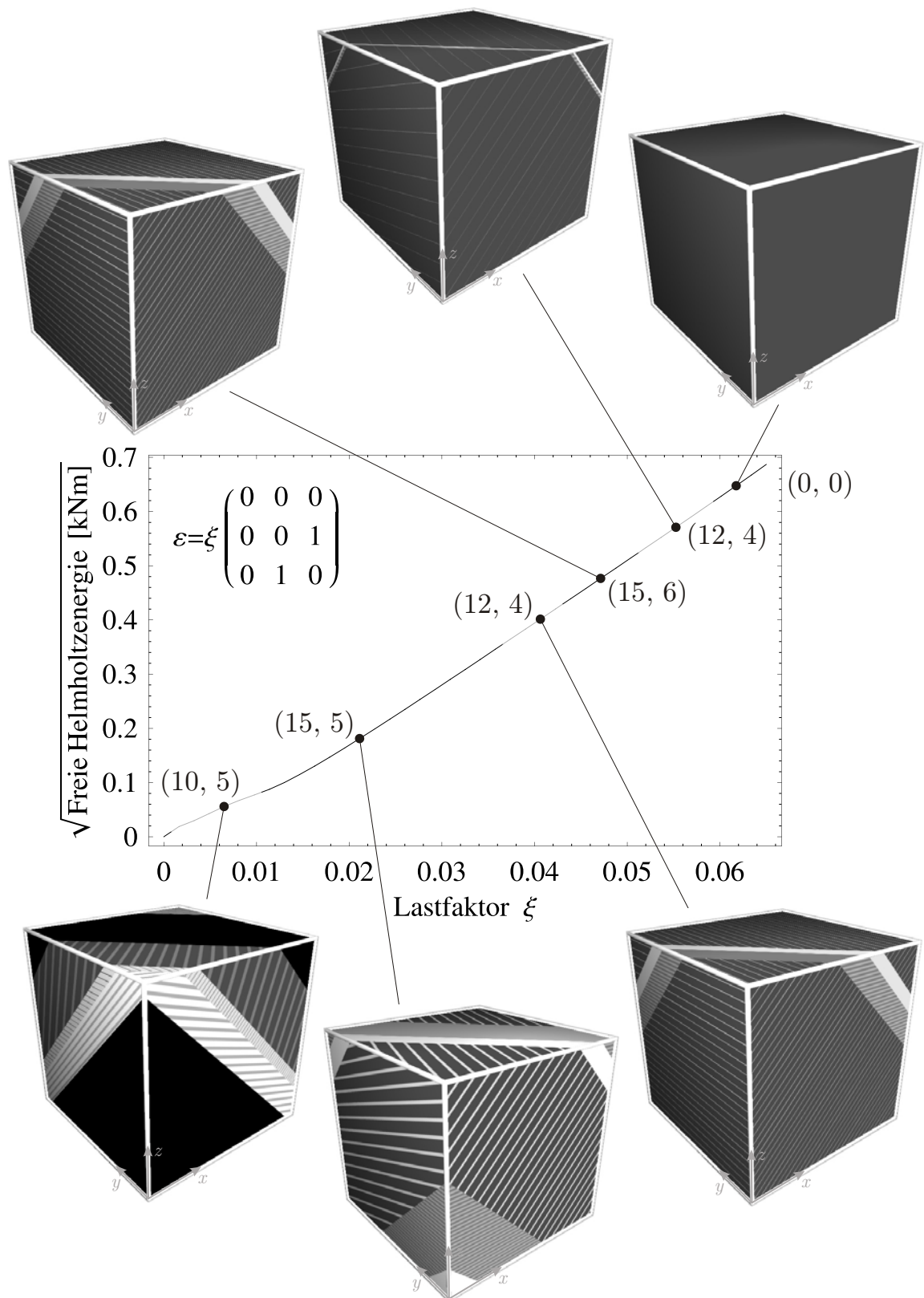


Abbildung 3.25.: Mikrostrukturentwicklung nach Laminatgrenze zweiter Ordnung, reine Scherung.

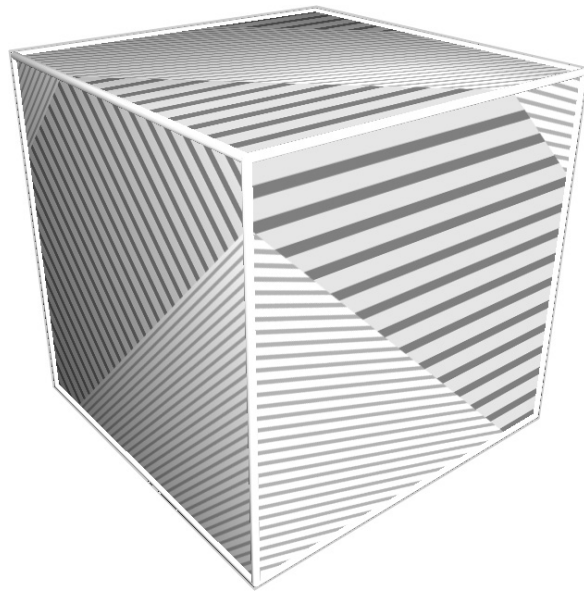


Abbildung 3.26.: Erwartete Mikrostruktur im einachsigen Zugversuch nach Laminatgrenze zweiter Ordnung.

4. Materialverhalten polykristalliner Formgedächtnismaterialien

In diesem Kapitel wird die Betrachtung von ein- auf vielkristalline Formgedächtnislegierungen erweitert. Eine Mikroskopie eines solchen polykristallinen martensitisch transformierenden Werkstoffes zeigt Abb. 4.1.

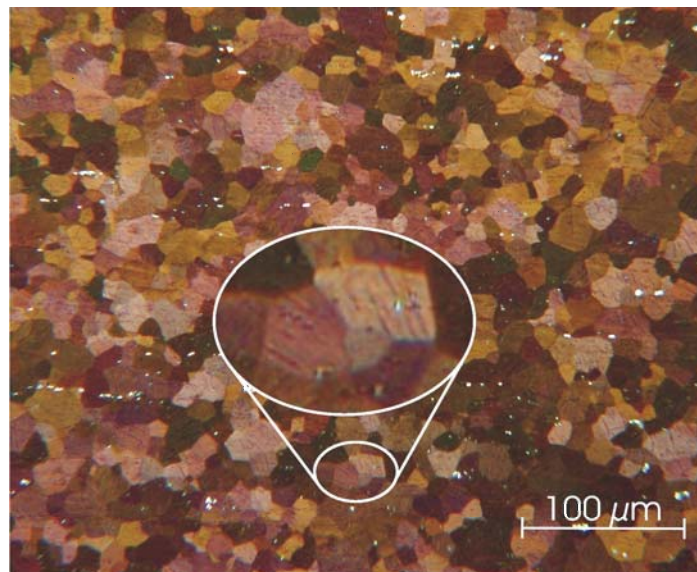


Abbildung 4.1.: Mikroskopie einer polykristallinen Formgedächtnislegierung ($\text{Ni}_{48}\text{Ti}_{50}\text{Fe}_2$) mit vereinzelt Martensitnadeln. Mikroskopie von J. Frenzel und J. Pfetzing, siehe auch Zhang et al. (2006).

Wie in der Mikroskopie zu erkennen ist, besteht ein solches polykristallines Material aus einer hohen Anzahl einzelner Kristalle, von denen jeder im Folgenden wie die in Kapitel 3 betrachteten Einkristalle behandelt wird. Insbesondere wird die Flexibilität des Materialverhaltens dadurch abgebildet, dass die Transformation von Austenit zu Martensit, die in Abb. 4.1 in Gestalt einiger vereinzelter Martensitnadeln zu erkennen ist, für jeden einzelnen Kristallit modelliert wird.

Das hier und in Hackl and Heinen (2007) eingeführte Modell gilt für Temperaturbereiche in der Nähe der jeweiligen Transformationstemperaturen, während Rekristallisation, die in der Regel bei wesentlich höheren Temperaturen stattfindet, ausgeschlossen sein soll. Dies hat insbesondere zur Folge, dass die einzelnen Körner im Polykristall weder wachsen noch schrumpfen, und dass sich demzufolge die zu einer bestimmten Kristallorientierung gehörenden Volumenanteile nicht durch Belastung ändern können.

Die im vorigen Kapitel dargestellten Überlegungen hatten zum Ziel, die einer gegebenen Verformung entsprechende elastische Energie näher zu charakterisieren. Aus diesem Grund

wurde bislang auf die Betrachtung dissipativer Effekt verzichtet. In der Realität wird eine Veränderung der Volumenanteile verschiedener kristalliner Varianten jedoch stets mit einem gewissen Energieverlust verbunden sein. Dieser wird im Folgenden durch einen geeigneten Dissipationsansatz berücksichtigt.

4.1. Energetische Formulierung

Die Transformation von Austenit zu Martensit wird durch die zugehörige Transformations- oder Bain-Dehnung η_i beschrieben, wie sie beispielhaft in Kap. 2.2 hergeleitet wurde. Hierbei läuft i wiederum von 0 (Austenit) bis zur Anzahl n der martensitischen Varianten.

Manche Formgedächtnislegierungen weisen nicht nur eine austenitische und eine martensitische Struktur auf, sondern können zusätzlich auch Zwischenstufen bilden. Das bekannteste Beispiel hierfür ist die rhomboedrische R-Phase bei der kubisch-monoklinen Transformation von NiTi. Im Rahmen des hier vorgestellten mikromechanischen Modells könnte eine solche Zwischenphase durch Einführung der zugehörigen Transformationsdehnungen und chemischen Energie ohne weiteres eingebunden werden. Hierbei würde die Austenitphase sowohl für den monoklinen Martensit als auch für die R-Phase als Referenzkonfiguration dienen. Da die R-Phase vier symmetrieverwandte Varianten aufweist, würde sich die Anzahl n der nicht-austenitischen Varianten von 12 auf 16 erhöhen. In Ermangelung präziser Materialdaten soll aber in den Beispielen auf die Betrachtung von Zwischenphasen verzichtet werden.

Ein idealer Polykristall besteht aus unendlich vielen, beliebig orientierten Kristalliten. Um ein numerisch besser handhabbares Modell zu erhalten, wird die Anzahl der Orientierungen auf eine große, aber endliche Anzahl N beschränkt. Dies entspricht auch bei realen polykristallinen Materialien der Wirklichkeit, da auch hier die Anzahl der Kristallite endlich sein muss.

Des Weiteren werden reale Proben und auch polykristalline Bauteile eine nicht-gleichmäßige Orientierungsverteilung aufweisen. So wird beispielsweise ein durch Walzen gefertigter austenitischer Probenkörper in der Regel eine Vorzugsorientierung der Austenitzellen aufweisen, welche orthogonal zur Walzrichtung stehen wird.

Die ursprüngliche Orientierungsverteilung im unbelasteten Zustand kann grundsätzlich mittels eines Young-Maßes $\xi(\mathbf{R}, \mathbf{x})$ beschrieben werden. Dieses Maß gibt die Wahrscheinlichkeit an, ein Korn einer bestimmten Orientierung zu finden, und zwar in Abhängigkeit vom Ort \mathbf{x} sowie von der durch einen Rotationstensor $\mathbf{R} \in SO_3$ beschriebenen Kornorientierung.

Für die numerischen Beispiele in Kap. 4.3 wird jeweils eine einfache Walztextur angenommen, in der die Normalenvektoren auf die $\{1, 0, 0\}$ -Austenit-Ebenen eine bevorzugte Richtung \mathbf{n}_{Vorz} aufweisen. Abweichungen von dieser bevorzugten Orientierung werden mit der ortsunabhängigen Orientierungsverteilungsfunktion

$$\xi(\mathbf{R}) = \max_{k=1, \dots, n} [\mathbf{n}_{\text{Vorz}} \cdot \mathbf{R} \cdot \mathbf{n}_{\{1,0,0\},k}]^q \quad (4.1)$$

bestraft. Hierbei steht $\mathbf{n}_{\{1,0,0\}}$ für die Menge aller Orientierungen der $\{1, 0, 0\}$ -Austenit-Normalenvektoren und $\mathbf{n}_{\{1,0,0\},k}$ für deren k tes Element. Der Exponent q bestimmt die Stärke

der Texturinhomogenität.

Da die Betrachtungen hier auf eine große, aber endliche Anzahl von Kornorientierungen begrenzt werden sollen, kann eine über SO_3 diskretisierte Version des Young-Maßes verwendet werden. Danach ergibt sich der zur Orientierung \mathbf{R}^j , $1 \leq j \leq N$, gehörige Volumenanteil $\xi^j = \xi(\mathbf{R}^j, \mathbf{x})$, wobei die Volumenanteile so zu normieren sind, dass $\sum_{j=1}^N \xi^j = 1$.

Betrachtet man die zur i ten kristallographischen Variante gehörige Transformationsdehnung für die j te Kristallorientierung, so erhält man

$$\boldsymbol{\eta}_i^j = (\mathbf{R}^j)^T \cdot \boldsymbol{\eta}_i \cdot \mathbf{R}^j, \quad (4.2)$$

wobei tief gestellte Indizes hier und im Folgenden für verschiedene kristallographische Varianten ($i = 0, \dots, n$) und hochgestellte für verschiedene Kornorientierungen ($j = 1, \dots, N$) stehen.

Im Allgemeinen weisen weder die elastischen Konstanten des Austenits noch die des Martensits Isotropie auf. Aus diesem Grund muss auch der Materialtensor \mathbb{C} der i ten Variante jeweils entsprechend der Kornorientierung j gedreht werden:

$$\mathbb{C}_{ipqrs}^j = R_{ip}^j R_{uq}^j R_{vr}^j R_{ws}^j \mathbb{C}_{iuvw}. \quad (4.3)$$

Die chemische Energie α_i unterscheidet sich auch im Polykristall lediglich zwischen Austenit ($i = 0$) und Martensit ($1 \leq i \leq n$), aber nicht zwischen verschiedenen Martensitvarianten oder Kornorientierungen. Insgesamt ergibt sich somit

$$\Psi_i^j(\boldsymbol{\varepsilon}_i^j) = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon}_i^j - \boldsymbol{\eta}_i^j) : \mathbb{C}_i^j : (\boldsymbol{\varepsilon}_i^j - \boldsymbol{\eta}_i^j) + \alpha_i. \quad (4.4)$$

als Energiedichte der i ten Variante eines Korns der Orientierung j .

Der Volumenanteil, den diese Variante innerhalb ihres Korns einnimmt, wird nun als c_i^j bezeichnet. Die zu postulierende Massenerhaltung einer jeden Kristallorientierung lässt sich demzufolge als

$$\sum_{i=0}^n c_i^j = 1 \quad \text{für } j = 1, \dots, N \quad (4.5)$$

formulieren. Mittelung über die Dehnungen aller Varianten für alle Kristallorientierungen ergibt die makroskopische Dehnung

$$\boldsymbol{\varepsilon} = \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \xi^j c_i^j \boldsymbol{\varepsilon}_i^j. \quad (4.6)$$

Die für Formgedächtnismaterialien charakteristische Flexibilität kann, wie in den vorangegangenen Kapiteln bereits erläutert, durch deren Fähigkeit erklärt werden, spontan zwischen Austenit und verschiedenen Martensitphasen zu transformieren. Im Falle polykristalliner Legierungen kann dieser Effekt zu verschiedenen Dehnungen für verschiedene Varianten und Kristallorientierungen führen.

Die Fähigkeit des Werkstoffes, in dieser Art auf eingeprägte Dehnungen zu reagieren, wird mathematisch als die Relaxierung der Energie für feste Volumenfraktionen \mathbf{c}

$$\Psi^{\text{rel}}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c}) = \inf_{\boldsymbol{\varepsilon}_i^j} \left\{ \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \xi^j c_i^j \Psi_i^j(\boldsymbol{\varepsilon}_i^j) \mid \boldsymbol{\varepsilon} = \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \xi^j c_i^j \boldsymbol{\varepsilon}_i^j \right\} \quad (4.7)$$

dargestellt. Die in Gl. (4.7) verwendete so genannte Konvexifizierungsmethode ist einer von vielen Wegen, Potentiale zu relaxieren. Eine Diskussion verschiedener, aufwändigerer Relaxierungsmethoden ist auch in Smyshlyaev and Willis (1998b), Hackl and Hoppe (2003) und Roubíček (1997) zu finden. Wie im vorherigen Kapitel anhand von einkristallinen Formgedächtniswerkstoffen gezeigt wurde, reicht jedoch die Genauigkeit der Reuß-Grenze, die einer Konvexifizierung entspricht, für diese Materialien völlig aus.

Die in Gl. (4.7) eingeführte Konvexifizierung kann für das hier vorgestellte Materialmodell analytisch berechnet werden. Zu diesem Zweck wird ein Lagrange-Parameter $\boldsymbol{\sigma}$ eingeführt, um die durch die vorgegebene globale Dehnung entstehende Nebenbedingung in (4.7) zu erfüllen. Dieser Parameter entspricht, wie sich später herausstellen wird, der gemittelten Spannung im Polykristall. Das Argument der Minimierung in (4.7) ergibt sich damit zu

$$\sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \xi^j c_i^j \Psi_i^j(\boldsymbol{\varepsilon}_i^j, \boldsymbol{\eta}_i^j) + \boldsymbol{\sigma} : \left(\boldsymbol{\varepsilon} - \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \xi^j c_i^j \boldsymbol{\varepsilon}_i^j \right). \quad (4.8)$$

Setzt man die Ableitung dieses Ausdruckes nach $\boldsymbol{\varepsilon}_i^j$ zu null, erhält man

$$\xi^j c_i^j (\boldsymbol{\varepsilon}_i^j - \boldsymbol{\eta}_i^j) = (\mathbb{C}_i^j)^{-1} : \xi^j c_i^j \boldsymbol{\sigma}, \quad (4.9)$$

und Summation über i und j ergibt

$$\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}_{\text{eff}} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\eta}_{\text{eff}}), \quad (4.10)$$

wobei folgende Abkürzungen verwendet wurden:

$$\mathbb{C}_{\text{eff}} = \left[\sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \xi^j c_i^j (\mathbb{C}_i^j)^{-1} \right]^{-1} \quad \text{und} \quad \boldsymbol{\eta}_{\text{eff}} = \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \xi^j c_i^j \boldsymbol{\eta}_i^j. \quad (4.11)$$

Einsetzen von (4.9) und (4.10) in die relaxierte Energie (4.7) führt schließlich zu

$$\Psi^{\text{rel}}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c}) = \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\eta}_{\text{eff}}) : \mathbb{C}_{\text{eff}} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\eta}_{\text{eff}}) + \alpha_{\text{eff}} \quad (4.12)$$

mit

$$\alpha_{\text{eff}} = \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \xi^j c_i^j \alpha_i. \quad (4.13)$$

Wie zuvor erwähnt, ergibt sich aus der relaxierten Energie die Spannung als partielle Ableitung von Gl. (4.12) nach $\boldsymbol{\varepsilon}$ zu dem bereits in Gl. (4.10) angegebenen Wert $\boldsymbol{\sigma} = \mathbb{C}_{\text{eff}} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\eta}_{\text{eff}})$.

Die energieminimierenden Kristalldehnungen $\boldsymbol{\varepsilon}_i^j$ können aus Gl. (4.9) zu

$$\boldsymbol{\varepsilon}_i^j = (\mathbb{C}_i^j)^{-1} : \mathbb{C}_{\text{eff}} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\eta}_{\text{eff}}) + \boldsymbol{\eta}_i^j \quad (4.14)$$

bestimmt werden.

4.2. Evolutionsgleichung

Im vorhergehenden Abschnitt wurde die freie Energie einer polykristallinen Formgedächtnislegierung für gegebene Volumenanteile c_i^j berechnet. Im Verlauf eines Belastungspfades ändern sich diese Volumenanteile. Die hier verwendete Vorgehensweise und Notation ist der zur globalen Optimierung der Laminatgrenze zweiter Ordnung in Kapitel 3.3.2 bereits verwendeten ähnlich.

Zur Berücksichtigung des mit der Volumenanteilsänderung verbundenen Energieverlustes wird die Dissipationsfunktion

$$\Delta(\dot{\mathbf{c}}) = r \sqrt{\sum_{j=1}^N \xi^j \sum_{i=0}^n (\dot{c}_i^j)^2} \quad (4.15)$$

definiert. Die Evolution der Volumenfraktionen lässt sich daraus mittels Minimierung der Gesamtleistung

$$\mathcal{L}(\mathbf{c}, \dot{\mathbf{c}}) = \frac{d}{dt} \Psi^{\text{rel}}(\boldsymbol{\varepsilon}, \mathbf{c}) + \Delta(\dot{\mathbf{c}}) = \frac{\partial \Psi^{\text{rel}}}{\partial \mathbf{c}} \dot{\mathbf{c}} + \Delta(\dot{\mathbf{c}}) \quad (4.16)$$

bezüglich der Volumenfraktionen $\dot{\mathbf{c}}$ für feste Dehnungen $\boldsymbol{\varepsilon}$ ermitteln. Diese Vorgehensweise wurde erstmals von Ortiz and Repetto (1999) vorgestellt. Der Term $-\partial \Psi^{\text{rel}} / \partial \mathbf{c}$ stellt hierbei die zur Volumenanteilsentwicklung $\dot{\mathbf{c}}$ thermodynamisch konjugierte Triebkraft dar. Diese wird im Folgenden mit

$$\begin{aligned} q_i^j &= -\frac{\partial \Psi^{\text{rel}}}{\partial c_i^j} \\ &= \xi^j \left[\boldsymbol{\eta}_i^j : \mathbb{C}_{\text{eff}} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\eta}_{\text{eff}}) + \frac{1}{2} (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\eta}_{\text{eff}}) : \left(\mathbb{C}_{\text{eff}} : (\mathbb{C}_i^j)^{-1} : \mathbb{C}_{\text{eff}} \right) : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\eta}_{\text{eff}}) - \alpha_i \right] \end{aligned} \quad (4.17)$$

abgekürzt.

Die Nebenbedingungen der Massenerhaltung und Nichtnegativität der Volumenfraktionen werden nun durch Lagrange-Parameter β^j bzw. Kuhn-Tucker-Parameter γ_i^j berücksichtigt. Damit ergibt Gl. (4.16):

$$-\mathbf{q}\dot{\mathbf{c}} + \Delta + \sum_{j=1}^N \left(\beta^j \sum_{i=0}^n \dot{c}_i^j \right) - \sum_{j=1}^N \sum_{i=0}^n \gamma_i^j \dot{c}_i^j \rightarrow \min . \quad (4.18)$$

Hierbei wurde für jede Kristallorientierung ein eigener Lagrange-Parameter β^j eingeführt, da im Rahmen dieser Arbeit davon ausgegangen werden soll, dass keine Rekristallisation stattfindet. Demzufolge muss die Massenerhaltung für jede Kornorientierung separat gelten.

Die Parameter γ_i^j sind für diejenigen Varianten inaktiv, also gleich null, welche positive Volumenanteile oder zwar keinen positiven Volumenanteil, dafür aber eine positive Volumenanteilsentwicklung aufweisen. Es gilt also:

$$\gamma_i^j \begin{cases} = 0 & \text{für } c_i^j > 0 \vee (c_i^j = 0 \wedge \dot{c}_i^j > 0) \\ > 0 & \text{sonst} \end{cases} . \quad (4.19)$$

Die mathematische Formulierung lässt sich durch Einführung der *passiven Mengen*

$$\mathcal{B}^j = \{i \mid \dot{c}_i^j = 0\} \quad (4.20)$$

sowie der *aktiven Mengen*

$$\mathcal{A}^j = \{i \in \mathcal{B}^j \mid \dot{c}_i^j > 0\} \cup \{i \notin \mathcal{B}^j\} . \quad (4.21)$$

vereinfachen. Wie in Kapitel 3.3.2 bezieht sich die Bezeichnung *aktiv* bzw. *passiv* hier erneut auf die kristallographischen Varianten und nicht, wie in der Mathematik üblich, auf die Nebenbedingungen in den Gleichungen. Letztere sind genau dann aktiv (d. h. $\dot{\gamma}_i^j > 0$), wenn die zugehörigen Varianten inaktiv sind ($\dot{c}_i^j = 0$).

Setzt man nun die Ableitung von Gl. (4.18) nach \dot{c}_i^j zu null und summiert über die zugehörigen aktiven Mengen, erhält man den Wert der Lagrange-Parameter

$$\beta^j = \frac{1}{n_{\mathcal{A}^j}} \sum_{k \in \mathcal{A}^j} q_k^j, \quad (4.22)$$

wobei $\sum_{i=0}^n \dot{c}_i^j = 0$ bedingt, dass der Dissipationsparameter hier nicht eingeht, und $n_{\mathcal{A}^j}$ für die Anzahl der Elemente in der aktiven Menge \mathcal{A}^j steht. Dieses Ergebnis wird nun zurück in die Ableitung von (4.18) nach \dot{c}_i^j eingesetzt, was auf

$$q_i^j - \frac{1}{n_{\mathcal{A}^j}} \sum_{k \in \mathcal{A}^j} q_k^j = r \xi^j \frac{\dot{c}_i^j}{\sqrt{\sum_{j=1}^N \xi^j \sum_{i=0}^n (\dot{c}_i^j)^2}} \quad \text{für } i \in \mathcal{A}^j \quad (4.23)$$

$$q_i^j - \frac{1}{n_{\mathcal{A}^j}} \sum_{k \in \mathcal{A}^j} q_k^j = -\dot{\gamma}_i^j < 0 \quad \text{für } i \notin \mathcal{A}^j, \quad (4.24)$$

führt. Die zweite Gleichung dient als „Schalter“: erfüllt eine Variante Gl. (4.24) nicht mehr, muss diese zur aktiven Menge \mathcal{A}^j hinzugefügt werden. Der linke Term in beiden Gleichungen wird erneut als *aktiver Deviator* $(\text{dev}_{\mathcal{A}^j} q)_i^j = q_i^j - \frac{1}{n_{\mathcal{A}^j}} \sum_{k \in \mathcal{A}^j} q_k^j$ abgekürzt.

Das Minimierungsproblem (4.18) wird nun durch Einführung seiner Legendre-Transformation

$$J(\mathbf{q}) = \sup \{ (\text{dev}_{\mathcal{A}} \mathbf{q}) \dot{\mathbf{c}} - \Delta \mid \dot{\mathbf{c}} \}, \quad (4.25)$$

umgeformt. So ergibt sich eine Form, die der klassischen Plastizität ähnlich und hier leichter aufzulösen ist. Die Auswertung von Gl. (4.25) führt auf eine „Fließfunktion“

$$\Phi(\mathbf{q}) = \left[\sum_{j=1}^N \frac{1}{\xi^j} \sum_{i=0}^n (\text{dev}_{\mathcal{A}^j} q_i^j)^2 \right] - r^2, \quad (4.26)$$

mit der sich $J(\mathbf{q})$ zu

$$J(\mathbf{q}) = \begin{cases} 0 & \text{für } \Phi(\mathbf{q}) \leq 0 \\ \infty & \text{sonst} \end{cases} . \quad (4.27)$$

ergibt. Hiermit lässt sich die Evolutionsgleichung

$$\dot{c}_i^j = \frac{\rho}{\xi_j} [\text{dev}_{\mathcal{A}^j} q_i^j]_{\mathcal{A}^j} \quad (4.28)$$

formulieren, wobei der Index \mathcal{A}^j eine Beschränkung des aktiven Deviators auf die aktive Menge bedeutet. Abschließend wird Gl. (4.28) noch durch die Kuhn-Tucker-Bedingungen

$$\rho \geq 0, \quad \Phi \leq 0, \quad \rho\Phi = 0 \quad (4.29)$$

sowie die Konsistenzbedingung

$$\text{dev}_{\mathcal{A}^j} q_i^j \leq 0 \quad \text{für } i \notin \mathcal{A}^j \quad (4.30)$$

ergänzt.

Eine ähnliche Vorgehensweise wie die hier erläuterte wurde auch in Mielke (2006) und Govindjee and Miehe (2001) angewandt.

4.3. Numerische Beispiele

Die Evolutionsgleichung (4.28) kann zusammen mit den Kuhn-Tucker-Bedingungen (4.29) mittels aus der Plastizität bekannter Algorithmen implementiert werden.

Für die numerische Implementierung des Modells genügt ein einfacher Prädiktor-Korrektor-Algorithmus, der für ausreichend kleine Schrittweiten ein stabiles numerisches Verhalten aufweist. Der Korrektor-Schritt kann hierbei mit einem Standard-Newton-Verfahren umgesetzt werden; aufgrund der hohen Anzahl ($n \cdot N$) von Unbekannten wurde dabei, trotz des damit verbundenen schlechten Konvergenzverhaltens für große Schrittweiten, eine Euler-Forward-Strategie angewandt, da beispielsweise eine Euler-Backward-Implementierung die Lösung sehr großer Gleichungssysteme erfordern würde.

Für die folgenden Beispiele wurden die von Sedláč et al. (2005) gemessenen elastischen Konstanten verwendet, welche auch in Anhang B.2 wiedergegeben sind. Von dieser Arbeitsgruppe wurden sowohl die Materialkonstanten des Austenits als auch die des Martensits in voller Anisotropie gemessen.

Die Inverse des Elastizitätstensors einer bestimmten Variante und Orientierung \mathbb{C}_i^j ist grundsätzlich mit der Definition

$$(\mathbb{C}_i^j)_{pqrs}^{-1} (\mathbb{C}_i^j)_{rstu} = \frac{1}{2} (\delta_{pt}\delta_{qu} + \delta_{pu}\delta_{qt}) . \quad (4.31)$$

möglich. Diese Gleichung jedoch für jede Variante jeder Kristallorientierung bei jedem Update von \mathbb{C}_{eff} zu lösen wäre sehr zeitaufwändig. Aus diesem Grund empfiehlt es sich, für die numerische Implementierung die Notation nach Mehrabadi and Cowin (1990) zu verwenden. Ähnlich der bekannten *Voigt'schen Notation*, Voigt (1966), werden hierbei die elastischen Konstanten in einer 6×6 -Matrix \mathbf{C} angeordnet. Hierbei kommt folgende Definition

zur Anwendung:

$$\begin{pmatrix} \sigma_{11} \\ \sigma_{22} \\ \sigma_{33} \\ \sqrt{2}\sigma_{23} \\ \sqrt{2}\sigma_{13} \\ \sqrt{2}\sigma_{12} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} C_{11} & C_{12} & \cdots & C_{16} \\ C_{21} & C_{22} & \cdots & C_{26} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{61} & C_{62} & \cdots & C_{66} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \varepsilon_{11} \\ \varepsilon_{22} \\ \varepsilon_{33} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{23} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{13} \\ \sqrt{2}\varepsilon_{12} \end{pmatrix}. \quad (4.32)$$

Die Tensoreigenschaften von \mathbf{C} wird in Mehrabadi and Cowin (1990) im Detail diskutiert. Für die hier vorliegende Anwendung reicht es aus, dass die Inverse nach Gl. (4.31) äquivalent zur Invertierung von \mathbf{C} im sechsdimensionalen kartesischen Raum ist.

Durch Anpassung der chemischen Energien α_i sowie des Dissipationsparameters r kann sowohl pseudoelastisches als auch pseudoplastisches Materialverhalten abgebildet werden. Als Beispiel für Pseudoelastizität werden folgende Werte gewählt: $\alpha_0 = -25 \text{ Nmm/mm}^3$, $\alpha_i = 0 \text{ Nmm/mm}^3 \forall i > 0$ und $r = 6 \text{ Nmm/mm}^3$. Die so ermittelten Dehnungs-Verschiebungskurven sind in Abb. 4.2 für axiale Belastung und reine Scherung dargestellt. Im oberen Plot ist eine deutliche Asymmetrie zwischen Zug- und Druckbelastung auszumachen. Dieses Phänomen entspricht verschiedenen experimentellen Beobachtungen und ergibt sich aus dem zuvor dargestellten Modell ohne weitere Parameteranpassung.

Um die Eignung des Modells zur Abbildung von pseudoplastischem Materialverhalten zu testen, werden die chemischen Energien auf die Werte $\alpha_0 = 20 \text{ Nmm/mm}^3$ für den Austenit und $\alpha_i = 0 \text{ Nmm/mm}^3 \forall i > 0$ für den Martensit und der Dissipationsparameter auf $r = 80 \text{ Nmm/mm}^3$ gesetzt. Erneut werden reine Scherung und axiale Belastung angenommen. Die Ergebnisse zeigt Abb. 4.3.

In den Abbildungen 4.2 und 4.3 ist jeweils auch der Einfluss der Anzahl der verwendeten Kristallorientierungen dargestellt. Es wird deutlich, dass das qualitative Materialverhalten bereits mit nur zehn Orientierungen abgebildet werden kann, während quantitative Konvergenz erst ab ungefähr einhundert Kristallausrichtungen zu beobachten ist.

Die Größe der Hysterese im vorliegenden Modell wird wesentlich durch die Wahl des Dissipationsparameters r gesteuert. Dessen Einfluss auf das vorhergesagte Materialverhalten verdeutlicht Abb. 4.4. Darin wurde das Beispiel aus Abb. 4.3 (oben) aufgegriffen und für 100 Kristallorientierungen und verschiedene Werte von r geplottet. Es zeigt sich, dass der Dissipationsparameter hauptsächlich die Hysteresehöhe und weniger deren Breite beeinflusst, welche im Wesentlichen durch die Transformationsdehnungen gegeben ist.

Der Einfluss der Textur auf das Materialverhalten ist in Abb. 4.5 dargestellt. Die Dehnungs-Verschiebungsbeziehungen wurden mit zwei unterschiedlichen Vorzugsrichtungen $\mathbf{n}_{\text{Vorz}} = (1, 0, 0)$ und $\mathbf{n}_{\text{Vorz}} = (1, 1, 1)$ sowie mit zwei Texturintensitäten $q = 2$ und $q = 4$ berechnet. Es wird deutlich, dass die Textur mit der Vorzugsorientierung parallel zur Lastrichtung die Transformation und damit die Verformung des Materials im Kompressionsbereich erleichtert. Im Zugbereich hat weder die Orientierung noch die Intensität der Textur einen nennenswerten Einfluss auf das Materialverhalten.

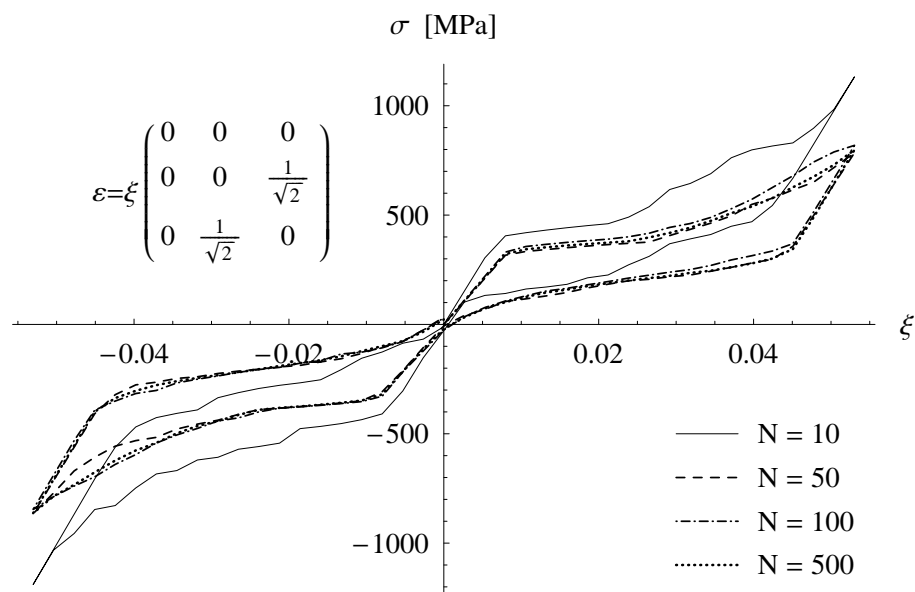
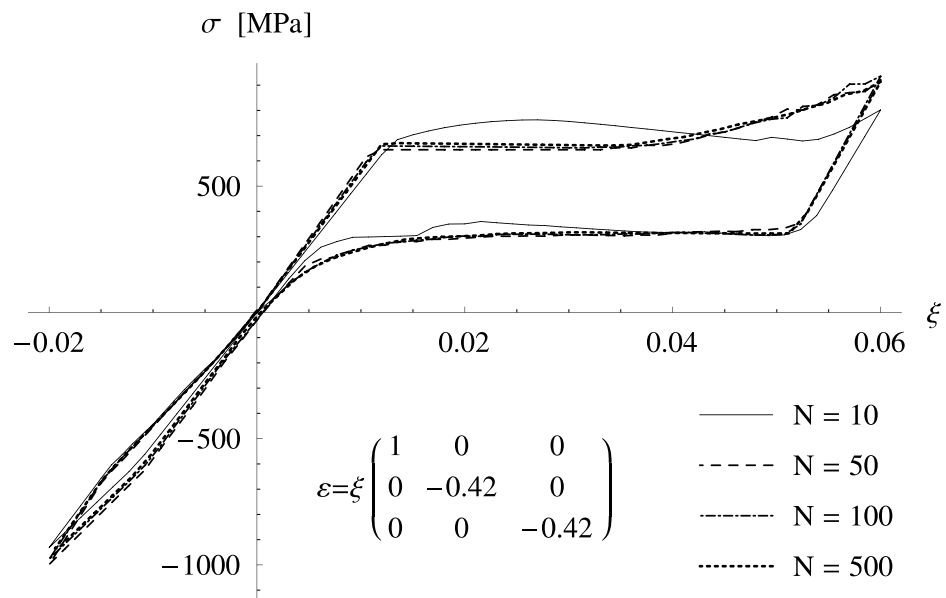


Abbildung 4.2.: Pseudoelastisches Materialverhalten, **oben:** axiale Belastung, **unten:** reine Scherung. Texturparameter: $\mathbf{n}_{\text{Vorz}} = (1, 0, 0)$ und $q = 2$.

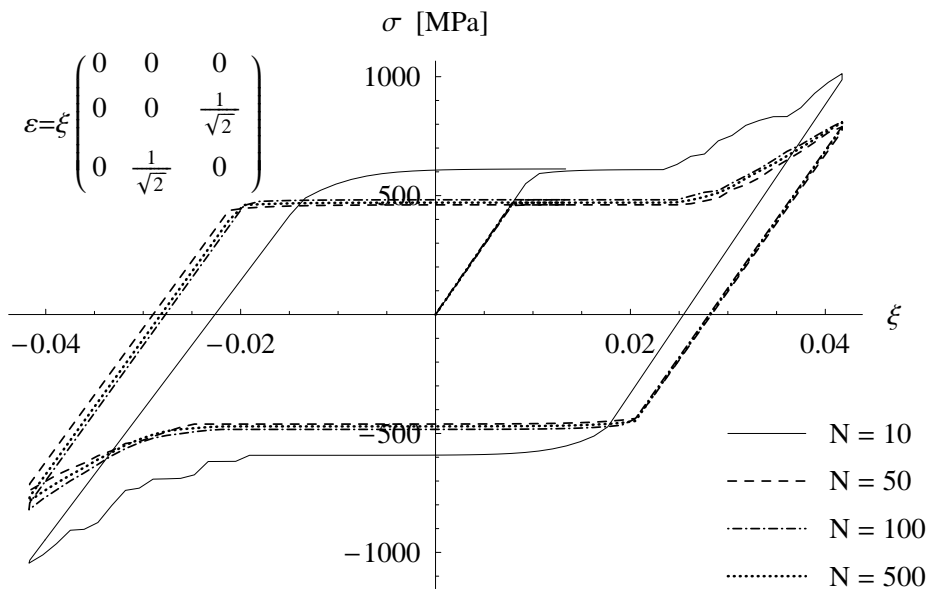
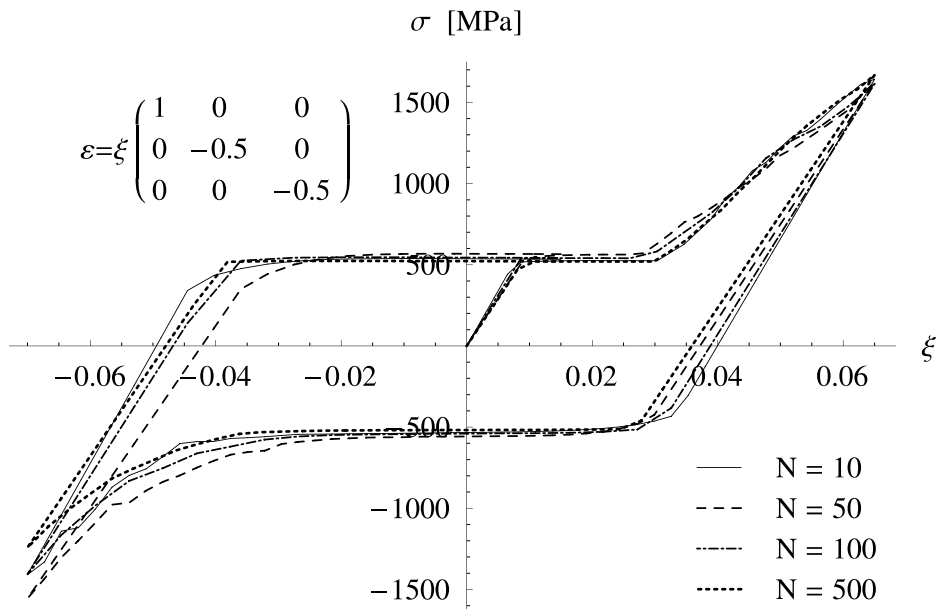


Abbildung 4.3.: Pseudoplastisches Materialverhalten, **oben:** axiale Belastung, **unten:** reine Scherung. Texturparameter: $\mathbf{n}_{\text{VorZ}} = (1, 0, 0)$ und $q = 2$

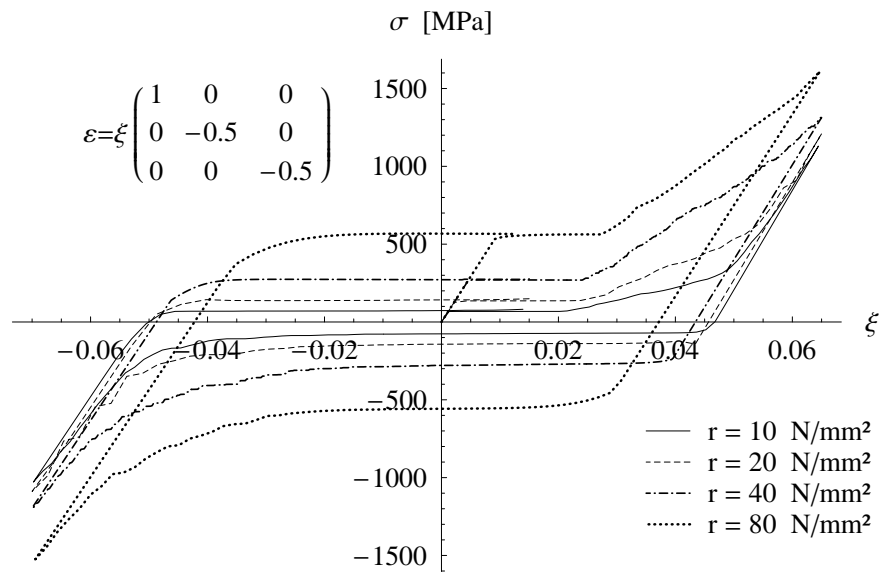


Abbildung 4.4.: Pseudoplastisches Materialverhalten und der Einfluss des Dissipationsparameters, axiale Belastung. Texturparameter: $\mathbf{n}_{\text{vorz}} = (1, 0, 0)$, $N = 100$ und $q = 2$

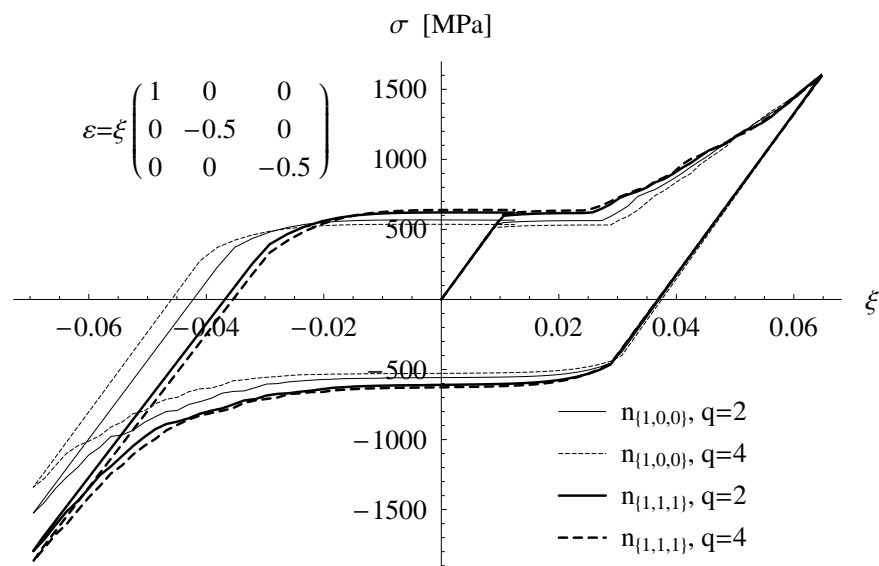


Abbildung 4.5.: Pseudoplastisches Materialverhalten und Einfluss der Textur, axiale Belastung. Texturparameter: $N = 100$ Kristallorientierungen.

4.4. Vorhersage der Texturentwicklung

Wie zuvor für monokristalline Formgedächtnismaterialien in Kap. 3.4 soll nun auch für das Polykristallmodell ein besonderes Augenmerk auf die Entwicklung der Mikrostruktur gelegt werden. Hierbei ist speziell die lastbedingte Änderung der Orientierungsdichtefunktion des Austenits sowie der martensitischen Varianten zu nennen.

Die wohl bekannteste Darstellung der Orientierungsdichteverteilung sind so genannte Polfiguren. Als Beispiel zeigt Abb. 4.6 die Evolution des residualen Austenits für reine Scherung. Hierbei wurde eine Anzahl von 5000 Orientierungen angenommen. Die kleinen Diagramme zeigen Polfiguren, welche eine Projektion des $(\mathbf{R}^j)^T \cdot (0, 0, 1)^T$ -Vektors eines jeden Kristallits auf die x - y -Ebene darstellen. Hierbei wurden die jeweiligen Punktdicken proportional zum Austenitanteil in der jeweiligen Kristallorientierung skaliert.

Um die Austenittextur besser sichtbar zu machen, wurde für Abb. 4.6 keine Vortextur angenommen. Wie erwartet transformiert der Austenit im Plateau zu Martensit. Es gibt jedoch einige Kristallite, in denen die Transformation nicht oder nicht vollständig stattfindet, da aufgrund deren Orientierung für die gegebene Lastsituation der Austenit energetisch günstiger ist. Diese Kristallite sind hauptsächlich in der Nähe der x - y -Ebene und der x - z -Ebene konzentriert, die senkrecht zur Scherebene liegen.

Eine ähnlicher Plot findet sich für pseudoelastische axiale Belastung in Abb. 4.7. Für die Kompression ist hierbei die Transformation weniger vollständig als für die Expansion. Dies entspricht auch der Asymmetrie des Hystereseverhaltens in der zugehörigen Last-Verschiebungskurve. Größere Konzentrationen des residualen Austenits finden sich im Bereich von 45° bis 60° von der Hauptlastachse. Des Weiteren sind kleinere Konzentrationsansammlungen in der x - y -Ebene sowie auf der x -Achse zu finden. Diese entsprechen Kristallen, welche nahezu vollständig in Lastrichtung ausgerichtet sind.

Um die in Abb. 4.6 und 4.7 dargestellten Polfiguren in höherer Auflösung darzustellen, bietet es sich an, statt einer Projektion der Einheitskugel auf eine Koordinatenebene die Abwicklung der Kugeloberfläche zu verwenden. Dem mitgedrehten Normalenvektor $(\mathbf{R}^j)^T \cdot (0, 0, 1)^T$ werden dann Kugelkoordinaten nach Abb. 4.8 zugeordnet.

Die Orientierungsdichteentwicklung für die zuvor bereits dargestellten Beispiele der axialen Belastung und der reinen Scherung zeigen Abb. 4.10 bis 4.12 und 4.14 bis 4.16 jeweils für den Austenit und zwei repräsentative Martensitvarianten. Die Punktdicken wurden jeweils sowohl in ihrer Dicke als auch in Ihrer Graustufe proportional zum zugehörigen Volumenanteil skaliert. Die Stellen im Spannungs-Dehnungsdiagramm, an denen die Orientierungsverteilungen jeweils ausgewertet wurden, zeigen Abb. 4.9 und 4.13. In dieser Darstellung wird deutlich, dass die Martensitvarianten ein komplexes dreidimensionales Reorientierungsverhalten aufweisen.

Die Ursache für die entstehenden Reorientierungsmuster liegt darin, dass je nach Kristallorientierung die Transformationsdehnung der betrachteten kristallographischen Variante des Martensits besser oder schlechter der gegebenen Dehnung entspricht. Zur Verdeutlichung sind in Abb. 4.17 für das Beispiel der axialen Belastung η_{1xx}^j und η_{5xx}^j in Abhängigkeit von den Kugelkoordinaten dargestellt, also diejenige Komponente der den Kristallorientierungen entsprechenden Transformationsdehnungen, welche entlang der Hauptdehnungs-

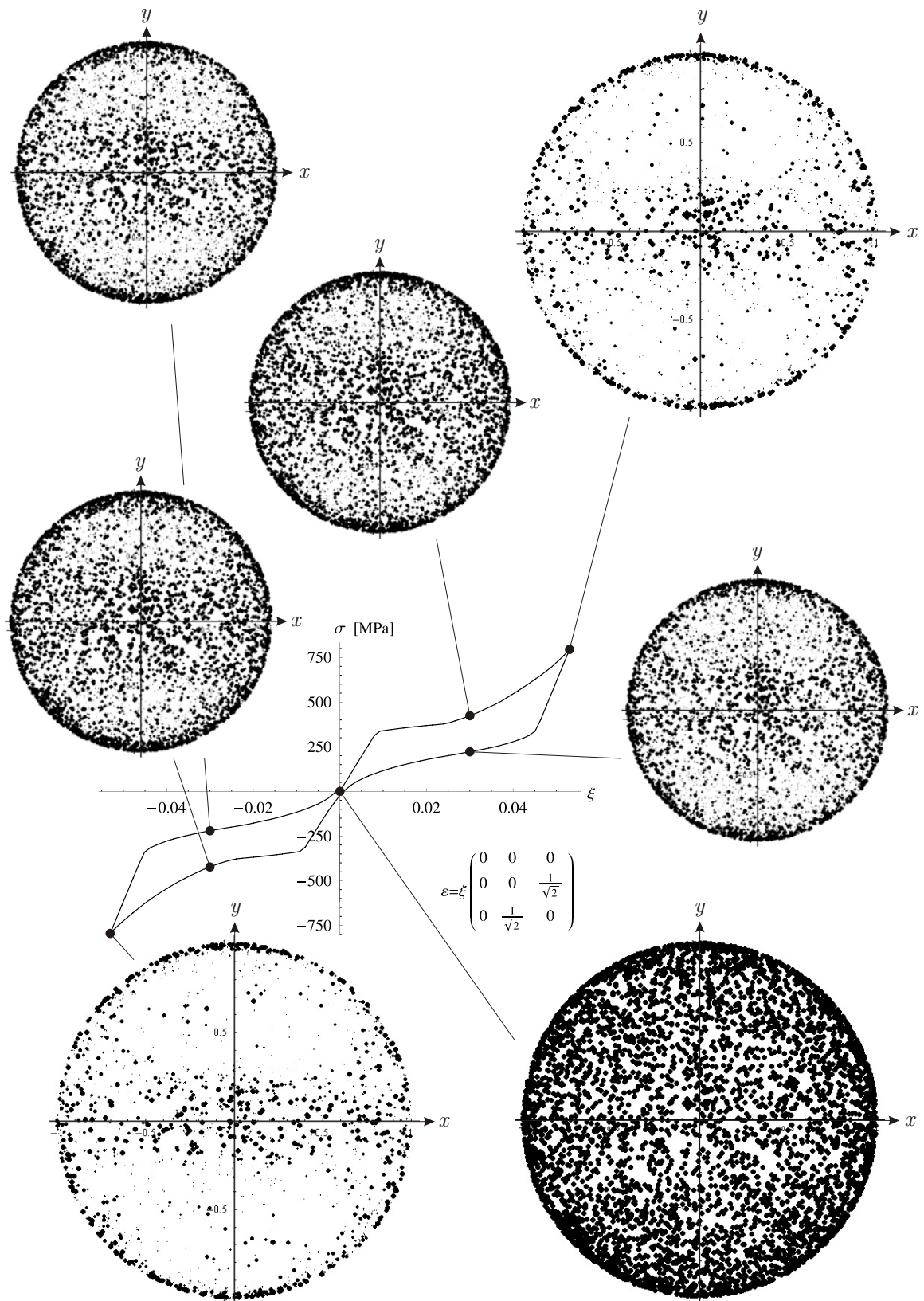


Abbildung 4.6.: Pseudoelastisches Materialverhalten und Austenitevolution, reine Scherung. Texturparameter: $\mathbf{n}_{\text{Vorz}} = (1, 0, 0)$, $N = 5000$ und $q = 0$

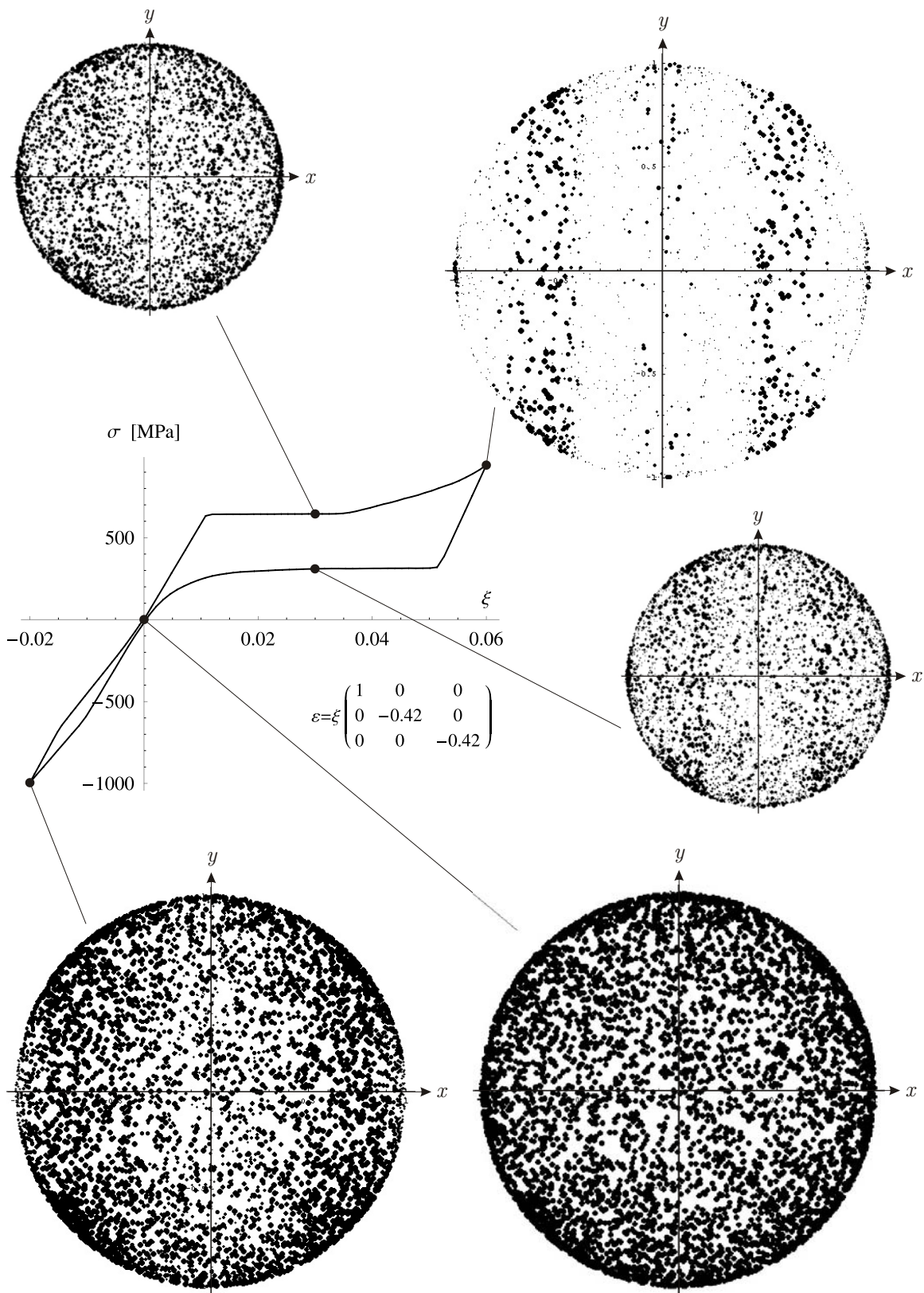
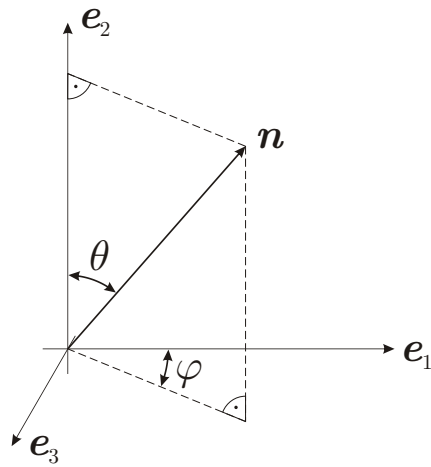
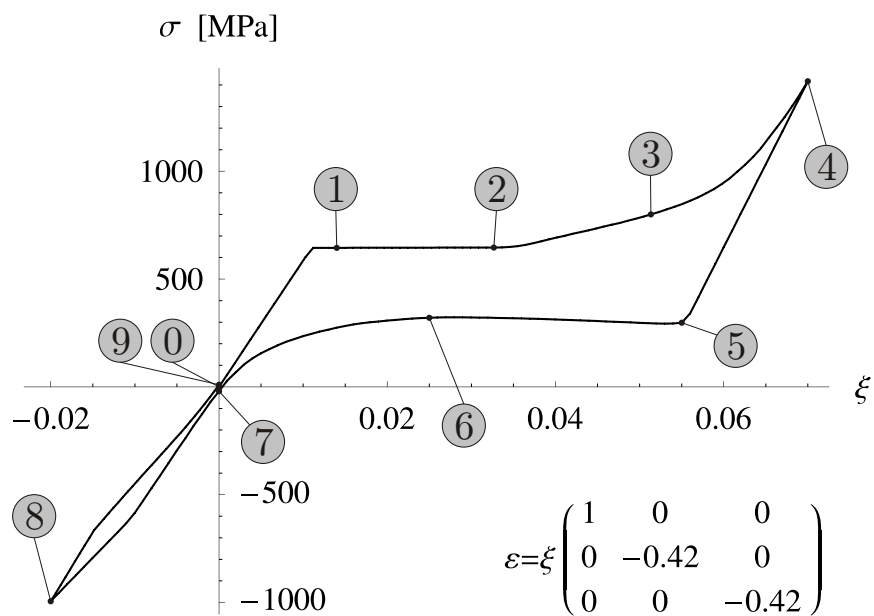


Abbildung 4.7.: Pseudoelastisches Materialverhalten und Austenitevolution, axiale Belastung. Texturparameter $\mathbf{n}_{\text{Vorz}} = (1, 0, 0)$, $N = 5000$ und $q = 0$.

Abbildung 4.8.: Definition der Kugelkoordinaten φ und θ .Abbildung 4.9.: Pseudoelastisches Materialverhalten und Punkte zur Texturdarstellung, axiale Belastung. Texturparameter $\mathbf{n}_{\text{vorz}} = (1, 0, 0)$, $N = 20000$ und $q = 0$.

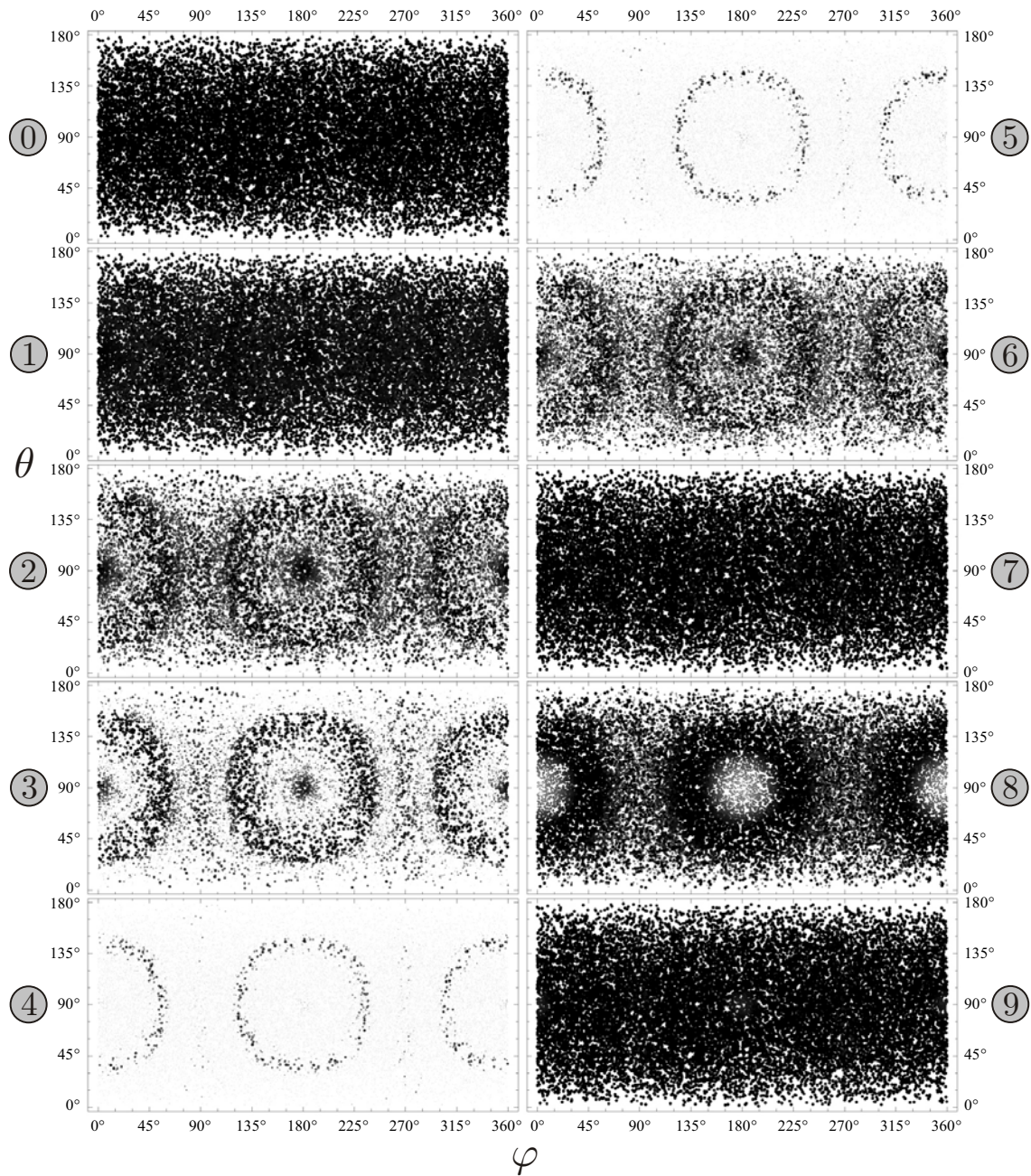


Abbildung 4.10.: Orientierungsdichteverteilung *Austenit* in Abhängigkeit von den Kugelkoordinaten φ und θ , axiale Belastung.

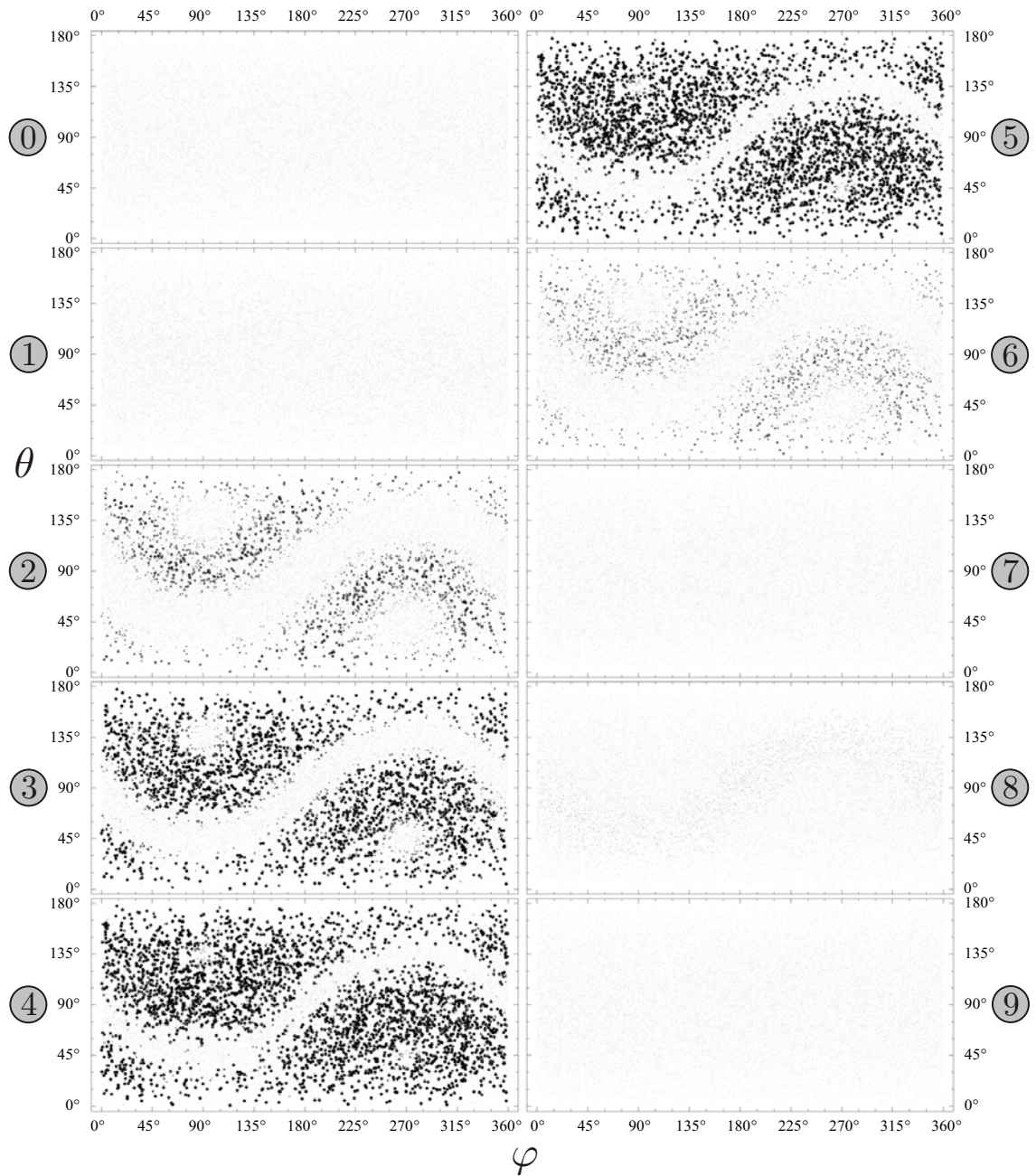


Abbildung 4.11.: Orientierungsdichteverteilung *Martensit-Variante 1* in Abhängigkeit von den Kugelkoordinaten φ und θ , axiale Belastung.

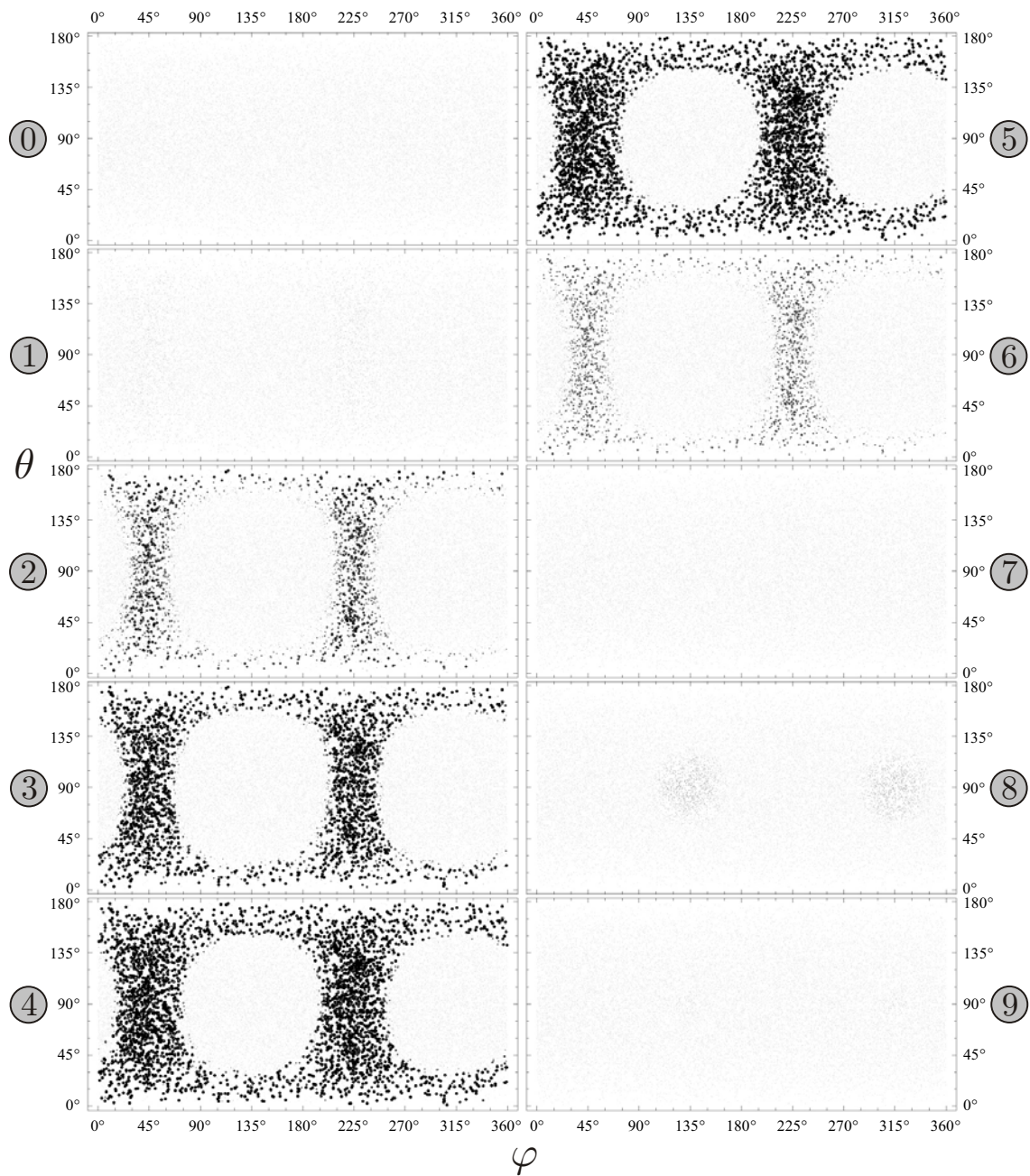


Abbildung 4.12.: Orientierungsdichteverteilung *Martensit-Variante 5* in Abhängigkeit von den Kugelkoordinaten φ und θ , axiale Belastung.

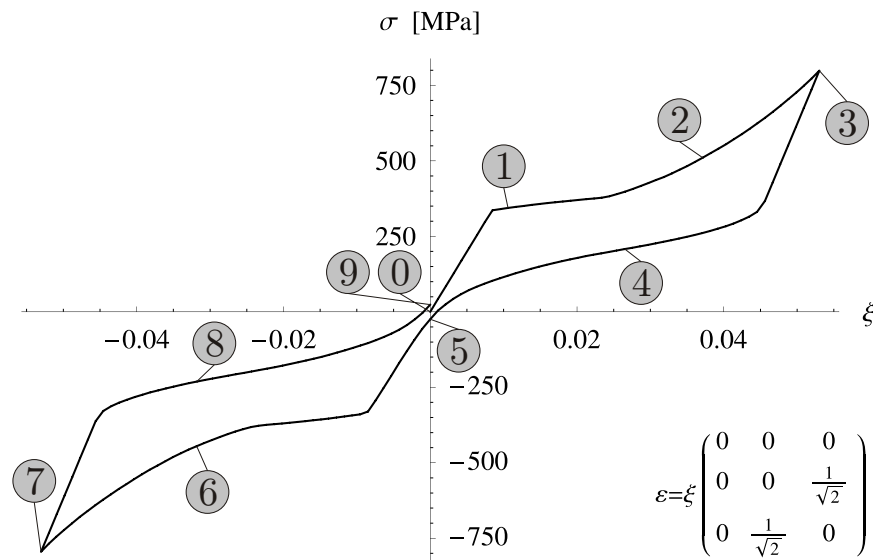


Abbildung 4.13.: Pseudoelastisches Materialverhalten und Punkte zur Texturdarstellung, reine Scherung. Texturparameter $\mathbf{n}_{\text{Vorz}} = (1, 0, 0)$, $N = 20000$ und $q = 0$.

richtung orientiert ist. Die sich so ergebenden Muster weisen, wie erwartet, deutliche Ähnlichkeit mit denen der Martensitreeorientierung der entsprechenden Varianten auf, siehe Abb. 4.11 und Abb. 4.12, jeweils Graphik 4.

Einen ähnlichen Vergleich zeigt Abb. 4.18 für die reine Scherung, wobei dem Lastfall entsprechend jeweils die yz -Komponenten der Transformationsdehnung abgebildet sind. Erneut sind große Ähnlichkeiten zu den zuvor dargestellten Reorientierungsmustern (Abb. 4.15 und Abb. 4.16, jeweils Graphik 3) zu erkennen.

In beiden Beispielen ist selbst an den Punkten größter gegebener Dehnung noch Restaustenit vorhanden. Dieser entfällt jeweils auf Kristallite, in denen keine der Martensitvarianten der äußeren Last entsprechend ausgerichtet sind. So weisen beispielsweise im Falle der axialen Belastung diejenigen Kristalle, in denen der Restaustenitanteil bei über 70% liegt, in der am günstigsten gelegenen Martensitvariante lediglich 2,8% Transformationsdehnung in Richtung der Last auf.

Wie bei genauer Betrachtung in den Abwicklungen der Orientierungsdichteverteilung zu erkennen ist, sind selbst in den Bereichen, in denen viele Orientierungen mit hohen Volumenanteilen zu finden sind, einzelne Kristallite vorhanden, die weit geringere Volumenanteile aufweisen. Dies liegt darin begründet, dass die Darstellungen in Abb. 4.10 bis 4.12 und 4.14 bis 4.16 die verschiedenen Rotationstensoren, mit denen die Kristallitorientierungen beschrieben werden, nur in Abhängigkeit davon auflösen, wie diese einen Vektor im Raum drehen. Hierbei bleibt ein Freiheitsgrad unberücksichtigt, nämlich eine weitere Rotation um den gedrehten Vektor¹. Dadurch entfallen auf viele Punkte in den Graphiken für eine kristallographische Variante sowohl günstiger als auch ungünstiger orientierte Kristallite.

Da stark unterschiedliche Intensitäten in unmittelbarer Nähe zueinander auftreten können, erscheint es als wenig sinnvoll, beispielsweise durch Interpolation zwischen benachbarten

¹ Anders ausgedrückt betrachten die Graphiken nur die ersten beiden Eulerwinkel für die Position der einzelnen Punkte, während der dritte einen Rotationstensor beschreibende Eulerwinkel unberücksichtigt bleibt.

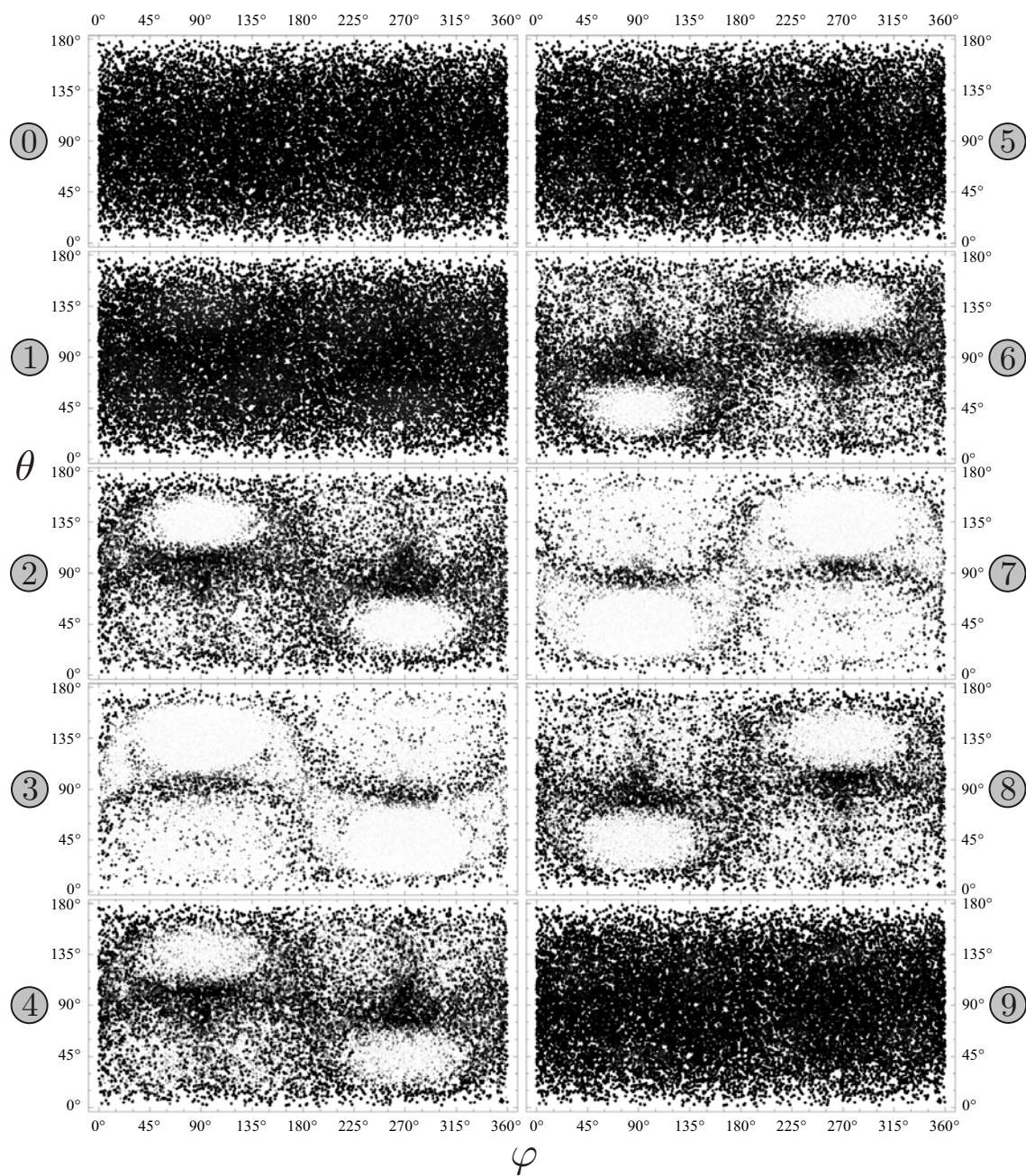


Abbildung 4.14.: Orientierungsdichteverteilung *Austenit* in Abhängigkeit von den Kugelkoordinaten φ und θ , reine Scherung.

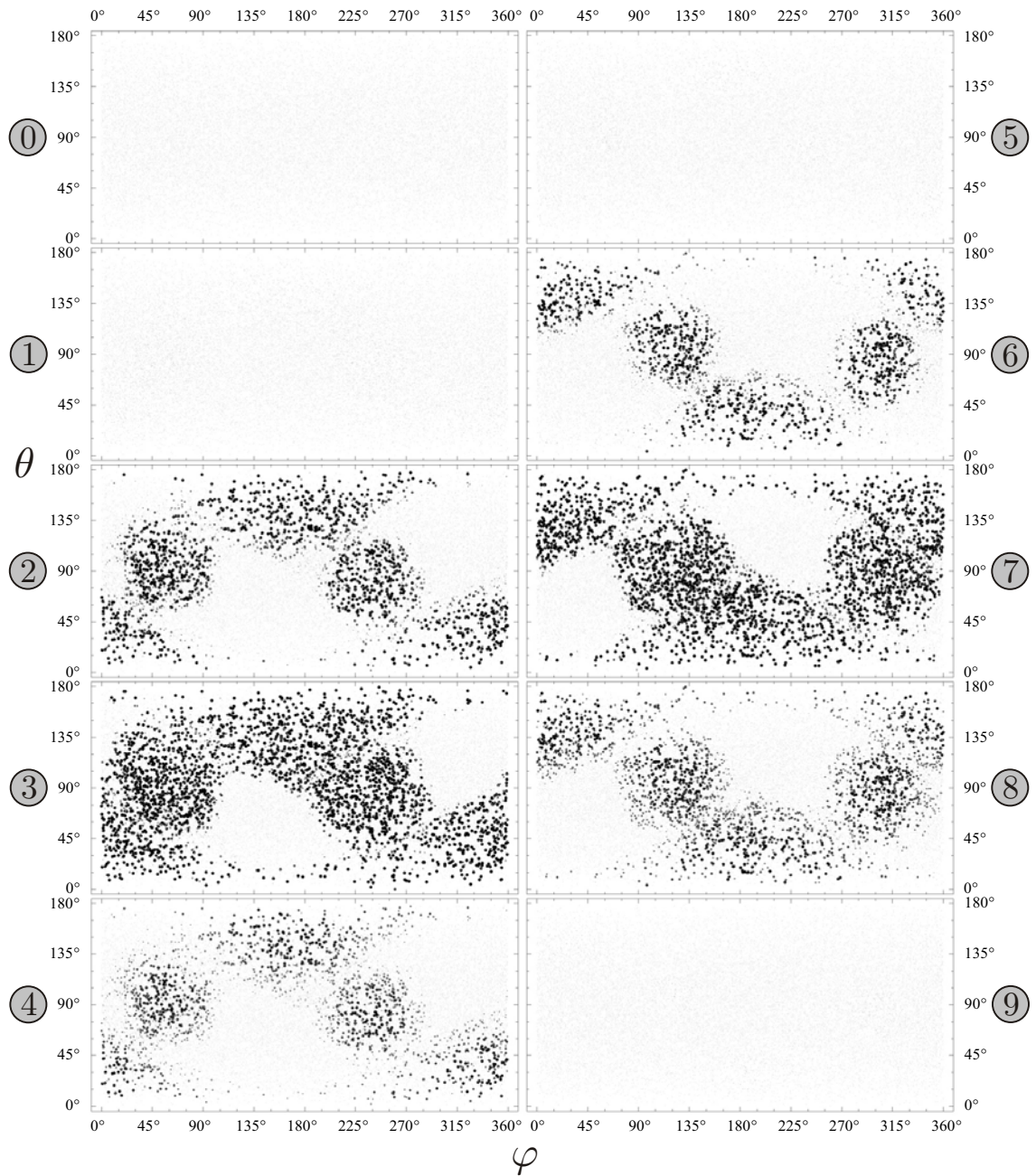


Abbildung 4.15.: Orientierungsdichteverteilung *Martensit-Variante 1* in Abhängigkeit von den Kugelkoordinaten φ und θ , reine Scherung.

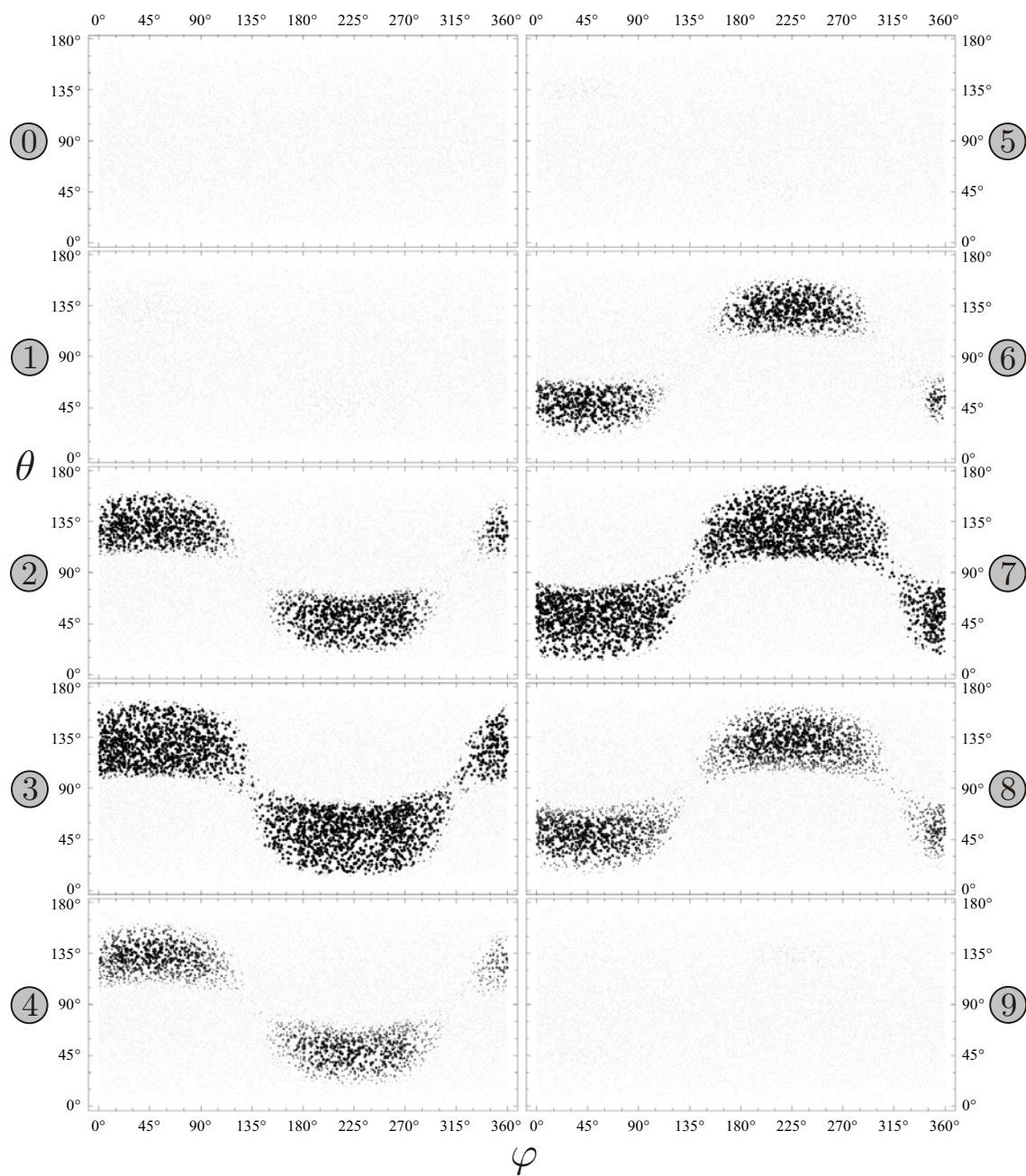


Abbildung 4.16.: Orientierungsdichteverteilung *Martensit-Variante 5* in Abhängigkeit von den Kugelkoordinaten φ und θ , reine Scherung.

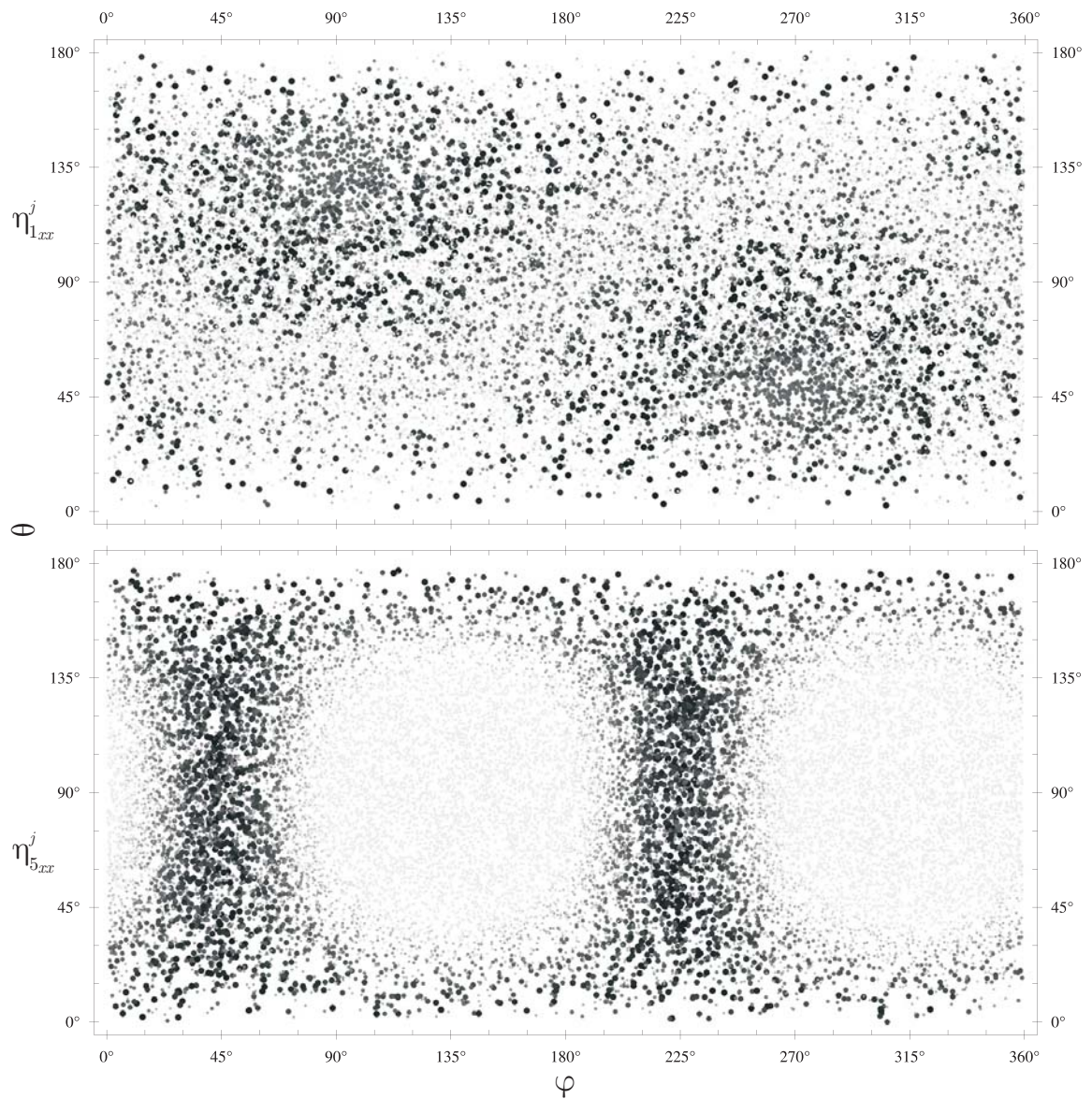


Abbildung 4.17.: Transformationsdehnungskomponenten η_{1xx}^j und η_{5xx}^j in Abhängigkeit von den Kugelkoordinaten φ und θ , axiale Belastung.

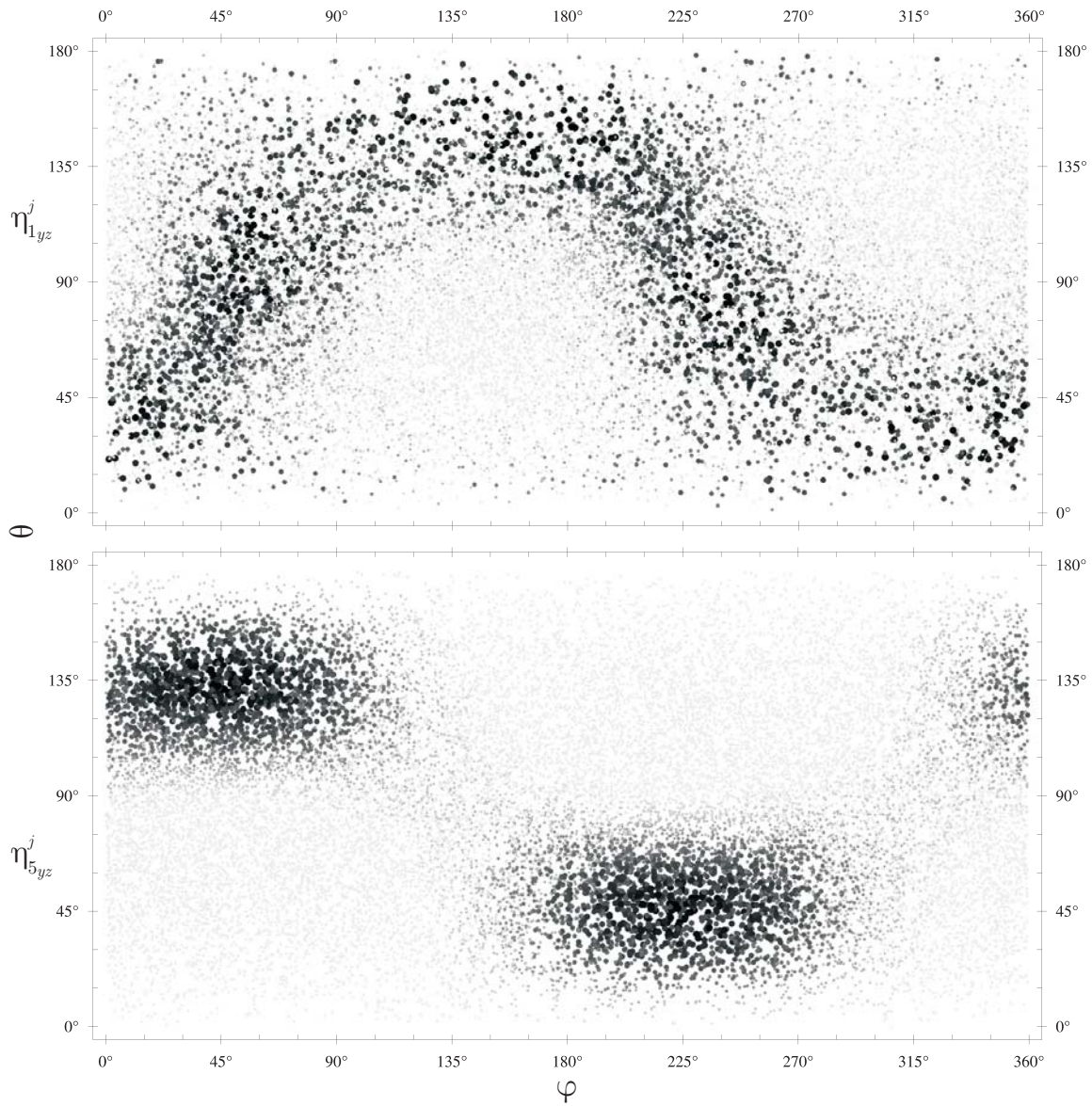


Abbildung 4.18.: Transformationsdehnungskomponenten η_{1yz}^j und η_{5yz}^j in Abhängigkeit von den Kugelkoordinaten φ und θ , reine Scherung.

Punkten eine Fläche zu definieren, die den Volumenanteil jedes einzelnen Kristallits als Höhenwert enthält. Stattdessen bietet sich eine Erfassung der Orientierungsdichteverteilung als integrale Größe an.

Eine solche Darstellung zeigt Abb. 4.19 im Vergleich zur zuvor präsentierten Einzelpunkt-darstellung. Bei der Integration, die entlang des Kugeläquators ($\theta = 90^\circ$) durchgeführt wurde, wurden die Volumenanteile aller Punkte mit der in Abb. 4.20 skizzierten, normalverteilten Funktion $f(\vartheta)$ gewichtet, wobei ϑ den Winkel bezeichnet, den eine Orientierung mit dem jeweils betrachteten Punkt auf der Einheitskugel einschließt.

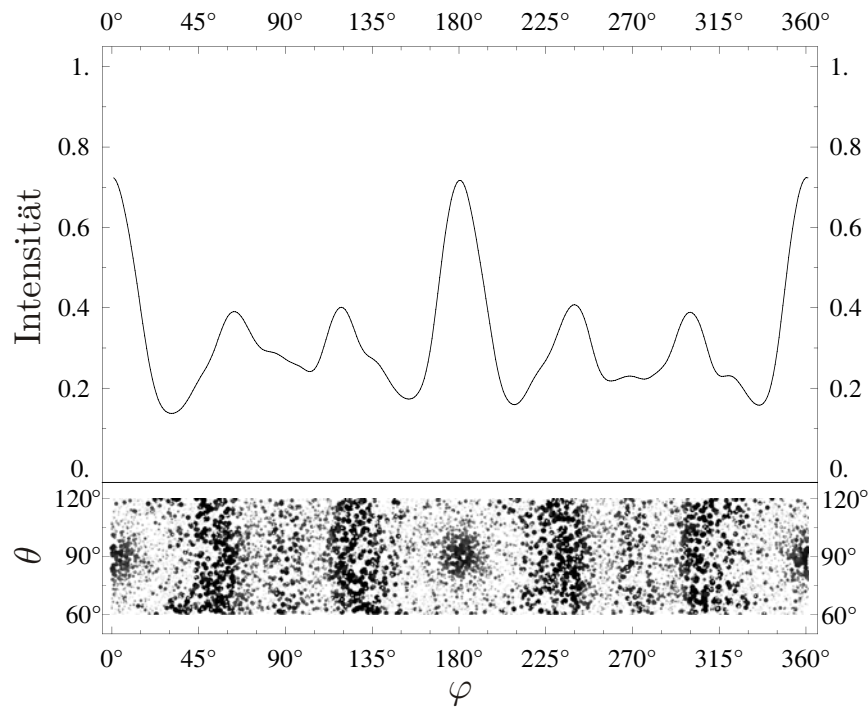


Abbildung 4.19.: Orientierungsdichtefunktion (oben) und -verteilung (unten), axiale Belastung, Punkt 3. Texturparameter $\mathbf{n}_{\text{vorz}} = (1, 0, 0)$, $N = 20000$ und $q = 0$.

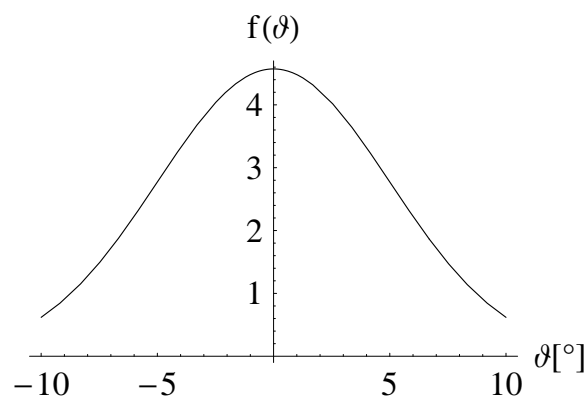


Abbildung 4.20.: Gewichtungsfunktion für Volumenanteilsintegration: Normalverteilung, Mittelwert 0 , Varianz 5° .

Aus Abb. 4.19 wird deutlich, dass die Darstellung der Orientierungsdichtefunktion als

Graph wesentlich übersichtlicher ist als die Einzeldarstellung aller Orientierungen. Außerdem hängt diese Visualisierungsart nicht von der Anzahl der betrachteten Orientierungen ab. Allerdings ist auf diese Art und Weise zunächst nur ein bestimmter Pfad auf der Einheitskugel (hier der Äquator) darstellbar. Letzterer Nachteil könnte durch eine mehrdimensionale Darstellung umgangen werden.

Die Orientierungsdichteentwicklung der zuvor bereits betrachteten Beispiele zeigen Abb. 4.21 und 4.22, wobei die gleichen kristallinen Varianten an den gleichen Lastpunkten wie in Abb. 4.10 bis 4.12 bzw. 4.14 bis 4.16 zur Darstellung ausgewählt wurden.

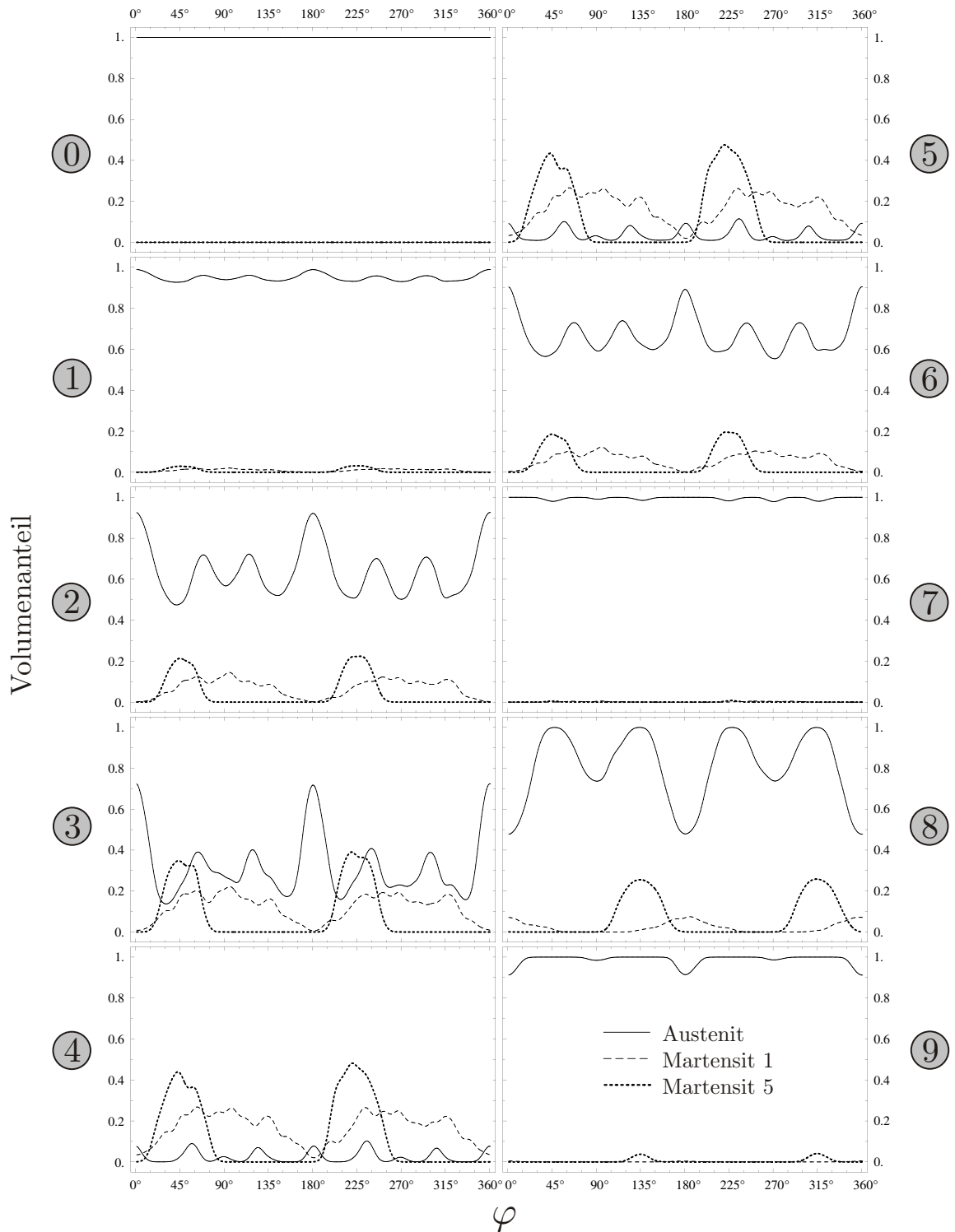


Abbildung 4.21.: Orientierungsdichtefunktionen von Austenit sowie Martensit-Varianten 1 und 5 in Abhängigkeit von der Kugelkoordinate φ am Äquator $\theta = 90^\circ$, axiale Belastung.

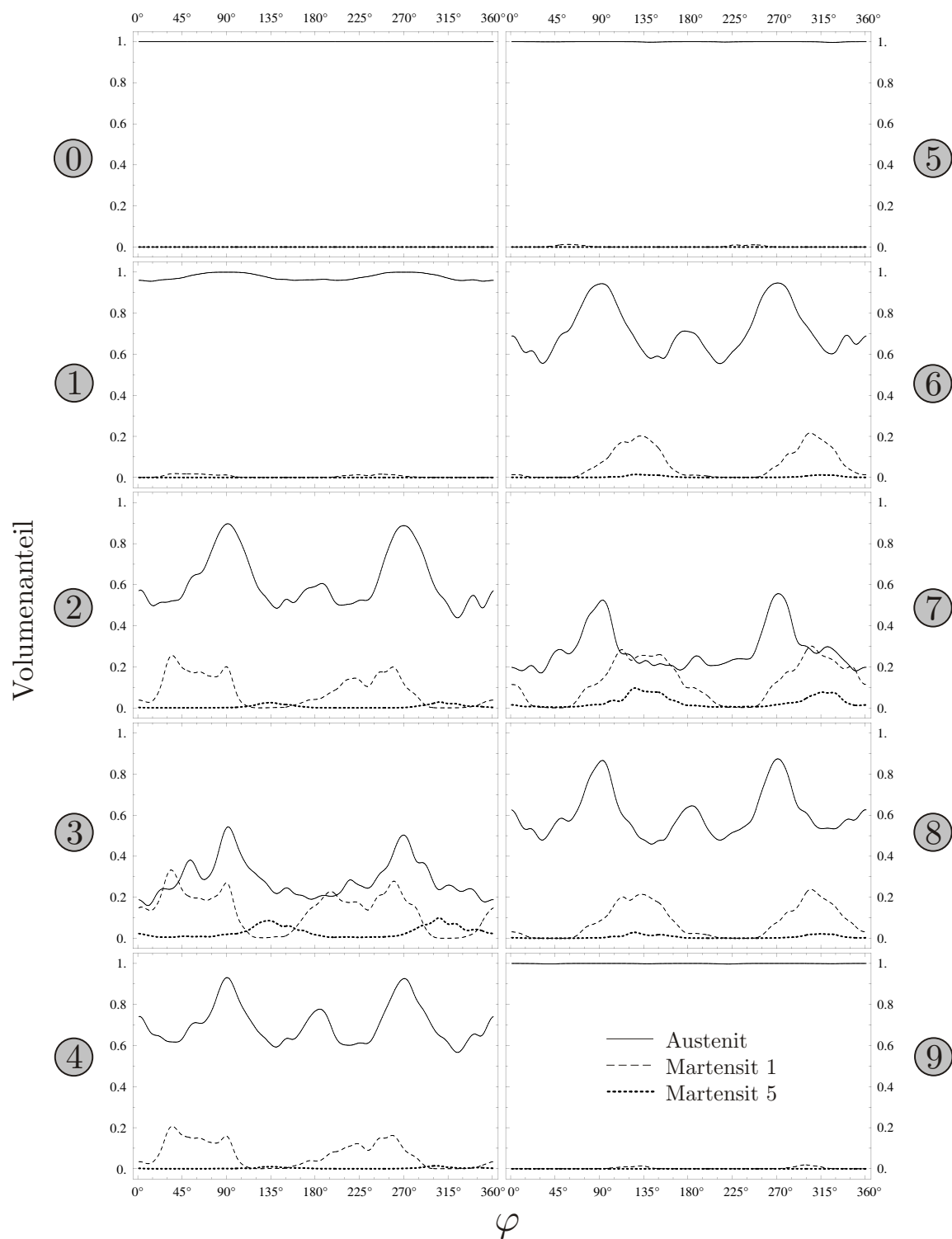


Abbildung 4.22.: Orientierungsdichtefunktionen von Austenit sowie Martensit-Varianten 1 und 5 in Abhängigkeit von der Kugelkoordinate φ am Äquator $\theta = 90^\circ$, reine Scherung.

4.5. Experimentelle Validierung

Um die Gültigkeit des zuvor erläuterten Polykristallmodells zu überprüfen, sollen die hierbei erzielten Ergebnisse mit experimentellen Beobachtungen verglichen werden. Ein solcher Vergleich wurde in Hackl et al. (2006) veröffentlicht.

Zu diesem Zweck bieten sich Durchstrahlungsexperimente an, wie sie unter anderem in Schmahl et al. (2004) und Hasan et al. (2007) beschrieben wurden. Den prinzipiellen Aufbau dieser Experimente zeigt Abb. 4.23. Senkrecht zum Strahlengang hochenergetischer Synchrotron-Röntgenstrahlung wird hierbei ein Probenkörper aus polykristallinem NiTi positioniert und in Zugrichtung einaxial belastet. Bei der Durchdringung des Körpers wird die Strahlung teilweise an den Netzebenen des Polykristalls gebeugt, wobei aus dem jeweiligen Beugungswinkel θ ermittelt werden kann, welcher Netzebentyp für die jeweilige Strahlungsablenkung verantwortlich ist.

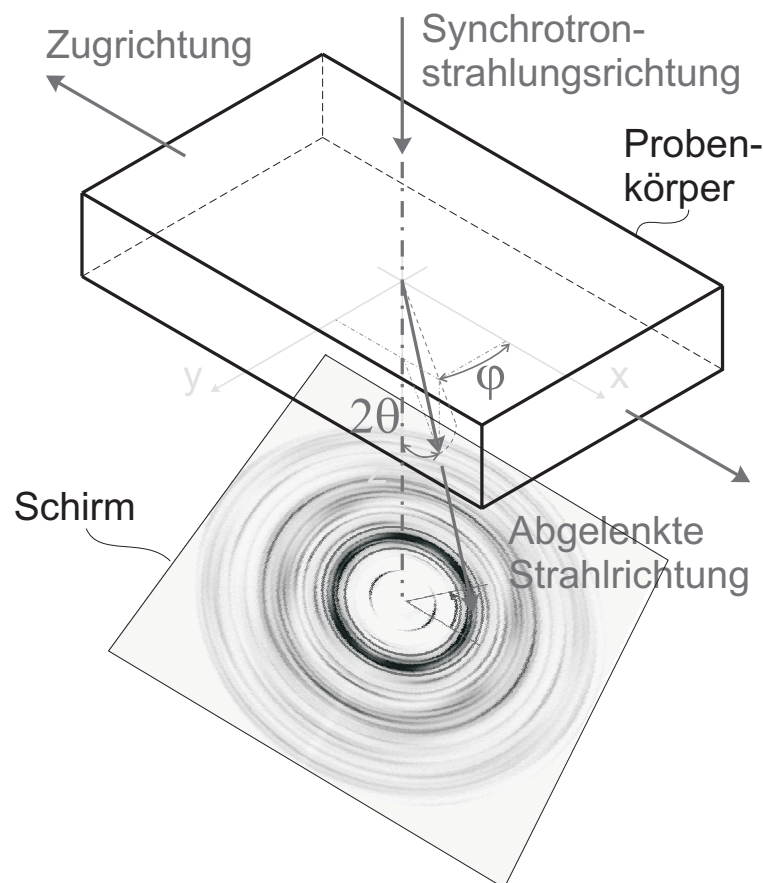


Abbildung 4.23.: Skizze des experimentellen Aufbaus für Synchrotron-Durchstrahlungsexperimente.

Die gebeugte Strahlung wird dann hinter dem Probenkörper mit einem Flächendetektor erfasst. Hierbei entstehen die ebenfalls in Abb. 4.23 beispielhaft dargestellten Debye-Scherrer-Ringe, auf denen die Strahlungsintensität in Abhängigkeit des so genannten Azimut-Winkels φ , der zuvor bereits als Kugelkoordinate eingeführt wurde, aufgezeichnet wird. So entsteht eine 360°-Darstellung der Orientierungsverteilungsfunktion der Netzebenen in der Belastungsebene.

Um die experimentellen Daten mit dem vom mikromechanischen Modell vorhergesagten Materialverhalten vergleichen zu können, sind zunächst zwei vereinfachende Annahmen notwendig:

1. Es wird davon ausgegangen, dass der Elastizitätstensor für alle Varianten und Orientierungen identisch ist: $\mathbb{C}_i^j = \mathbb{C} \forall i, j$. Diese Annahme erfordert zusätzlich Isotropie von \mathbb{C} .
2. Weiterhin wird angenommen, dass die Transformation ausschließlich im Spannungsplateau stattfindet, was sowohl von experimentellen Vorhersagen als auch von Berechnungen wie in den oben gezeigten im Wesentlichen bestätigt wird.

Durch diese Annahmen vereinfacht sich die zur Volumenanteilsevolution konjugierte Triebkraft nach Gl. (4.17) auf

$$q_i^j = \xi^j \left[\eta_i^j : \underbrace{\mathbb{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\eta}_{\text{eff}})}_{\boldsymbol{\sigma} = \text{konst.}} - \alpha_i \right]. \quad (4.33)$$

Da der effektive Elastizitätstensor aufgrund der ersten Annahme nicht von den Volumenanteilen abhängt, entfällt hierbei der zweite Summand in Gl. (4.17). Bei dem Ausdruck $\mathbb{C} : (\boldsymbol{\varepsilon} - \boldsymbol{\eta}_{\text{eff}})$ handelt es sich um die Plateauspannung $\boldsymbol{\sigma}$, welche nach der zweiten Annahme konstant ist.

Die Vortextur $\xi(\mathbf{R})$ wurde im Rahmen der Experimente ermittelt und kann daher als Eingangsinformation für den Vergleich verwendet werden. Des Weiteren ist die Elementarzelle geometrie des kubischen Austenits ($a_0 = 3.008582 \cdot 10^{-10} \text{m}$) sowie des monoklinen Martensits ($a = 4.585065 \cdot 10^{-10} \text{m}$, $b = 2.880011 \cdot 10^{-10} \text{m}$ und $c = 4.129873 \cdot 10^{-10} \text{m}$, sowie $\gamma = 95.9939^\circ$) für den verwendeten Werkstoff bekannt.

Nach Gleichung 4.28 verläuft die Volumenanteilsevolution näherungsweise proportional zur Triebkraft q . Die qualitative Orientierungsdichteverteilung kann daher nach folgender Gleichung abgeschätzt werden:

$$c^j = \max \{ 0, k_1 (\xi(\mathbf{R}^j) - k_2) (\eta^j : \boldsymbol{\sigma} - k_3) \}, \quad (4.34)$$

wobei die Unterscheidung zwischen den unterschiedlichen Martensitvarianten hier aufgrund der angenommenen Isotropie (erste Annahme) durch die verschiedenen Orientierungen als berücksichtigt angenommen werden kann. Die in Gleichung (4.34) eingeführten Parameter bedeuten hierbei:

- k_1 ist ein Proportionalitätsfaktor. Dieser bleibt für den hier angestrebten qualitativen Vergleich der Orientierungsverteilung unbestimmt.
- k_2 ist ein Parameter, mit dem das Rauschen aus den experimentellen Untersuchungen in der Ursprungsverteilung „abgeschnitten“ wird.
- k_3 quantifiziert die energetische Barriere, die aufgrund unterschiedlicher chemischer Energien sowie dissipativer Effekte bei der Transformation von Austenit zu Martensit überwunden werden muss.

Zur Berücksichtigung der Rücktransformation müsste k_3 für den Entlastungspfad verändert werden. Da die Experimente, mit denen das Modell in diesem Abschnitt verglichen werden soll, jedoch ausschließlich im Be- und nicht im Entlastungspfad durchgeführt wurden, kann dieser Aspekt im Folgenden vernachlässigt werden.

Durch die genannten Vereinfachungen konnte eine Abschätzung der lastinduzierten Martensitorientierung getroffen werden, die nur noch von der Art der im Versuch anliegenden Spannung (hier: einachsiger Zug), aber nicht mehr von der dadurch verursachten Dehnung abhängen. Dies vereinfacht den Vergleich zwischen experimentellen und analytischen Ergebnissen, da eine genaue Messung aller sechs Dehnungskomponenten mit einem hohen experimentellen Aufwand verbunden wäre.

In Abb. 4.24 ist der Vergleich zwischen der experimentell gemessenen Orientierungsdichte in der Prüfkörperebene und den entsprechenden mikromechanischen Triebkräften für drei verschiedene Netzebenen dargestellt. Offensichtlich weisen die Ergebnisse große Ähnlichkeit zueinander auf. Lediglich im Falle des 002-Rings sagt das mikromechanische Modell einfache Peaks bei 90° und 270° voraus, während experimentell Doppelpeaks beobachtet wurden. Ein möglicher Grund hierfür liegt darin, dass durch die vereinfachenden Annahmen zu Beginn dieses Abschnittes die Anisotropie im Materialverhalten des monoklinen Martensits im mikromechanischen Modell keine Berücksichtigung mehr findet.

Für die hier beschriebenen Experimente wurden flache Probenkörper verwendet (1,8 mm dick, 6 mm breit, 10 mm lang), welche durch Kaltwalzen hergestellt wurden. Durch diesen Herstellungsvorgang bildet sich im Inneren des bearbeiteten Bleches eine starke Textur aus. Indem nun ein Probenkörper entlang der oder senkrecht zur Walzrichtung aus dem Blech herausgeschnitten wird, lassen sich Experimente mit unterschiedlichen Vortexturen durchführen.

Während für die Diagramme in Abb. 4.24 eine entlang der Walzrichtung orientierte Probe verwendet wurde, zeigt Abb. 4.25 entsprechende Kurven für einen senkrecht zur Walzrichtung orientierten Testkörper. Es zeigt sich hierbei, dass sowohl die experimentellen als auch die analytischen Daten eine Verbreiterung des Peaks für den 020-Ring voraussagen. Für den 002-Ring ergeben sich nun auch experimentell einfache Peaks bei 90° und 270° , deren Breite allerdings vom Modell noch nicht korrekt erfasst wird.

Die größte Abweichung zwischen experimentellen und analytischen Ergebnissen weist der -111-Ring auf. Da dieser Plot auch die geringsten Werte der thermodynamischen Triebkraft aufweist, kann angenommen werden, dass hier vom mikromechanischen Modell noch nicht berücksichtigte Aspekte des Materialverhaltens, wie beispielsweise Oberflächenenergieanteile, dominieren.

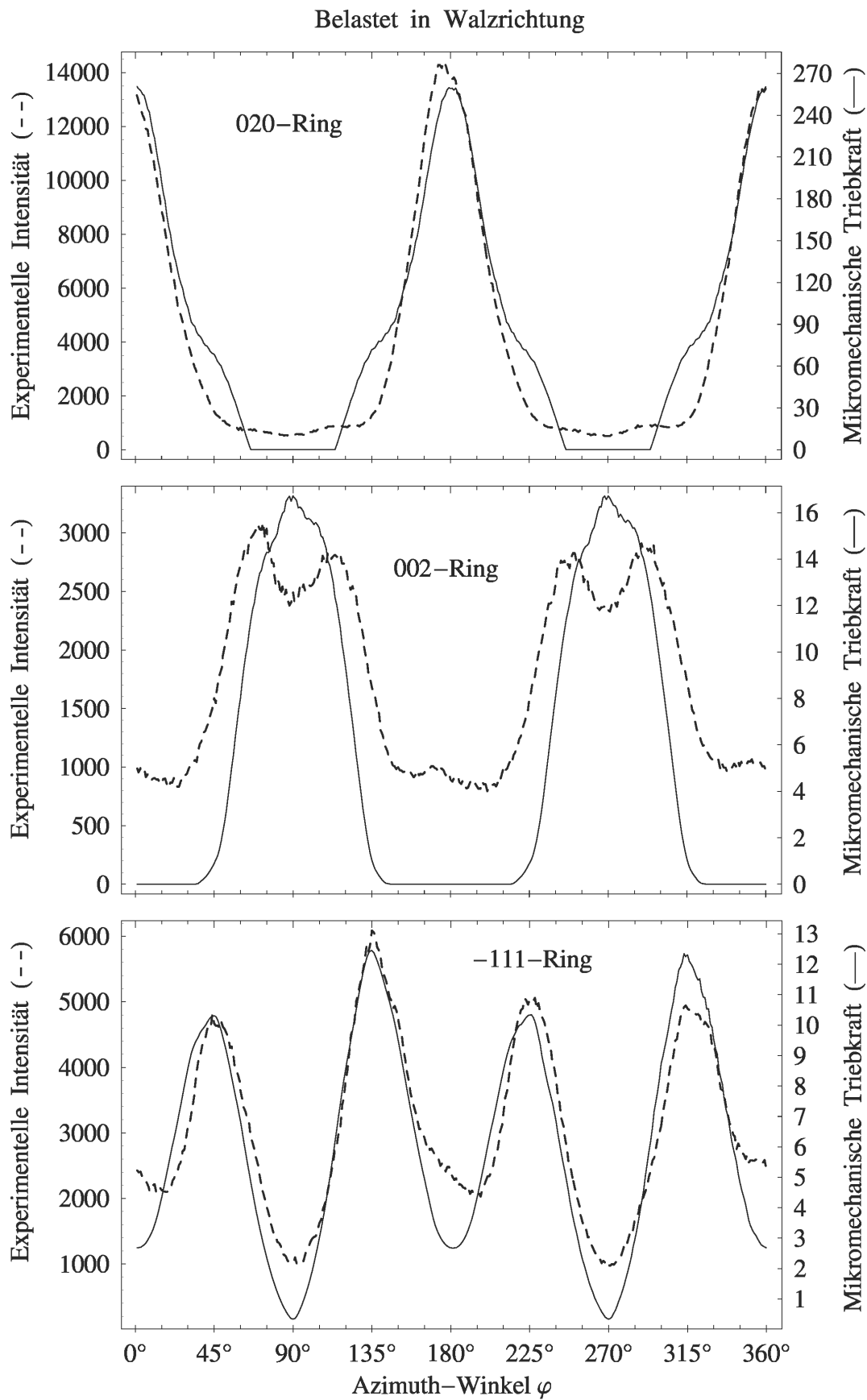


Abbildung 4.24.: Vergleich zwischen experimentell gemessenen und analytisch abgeschätzten Orientierungsdichteverteilungen, belastet in Walzrichtung, $k_2 = 0,2$, $k_3 = 0,92$.

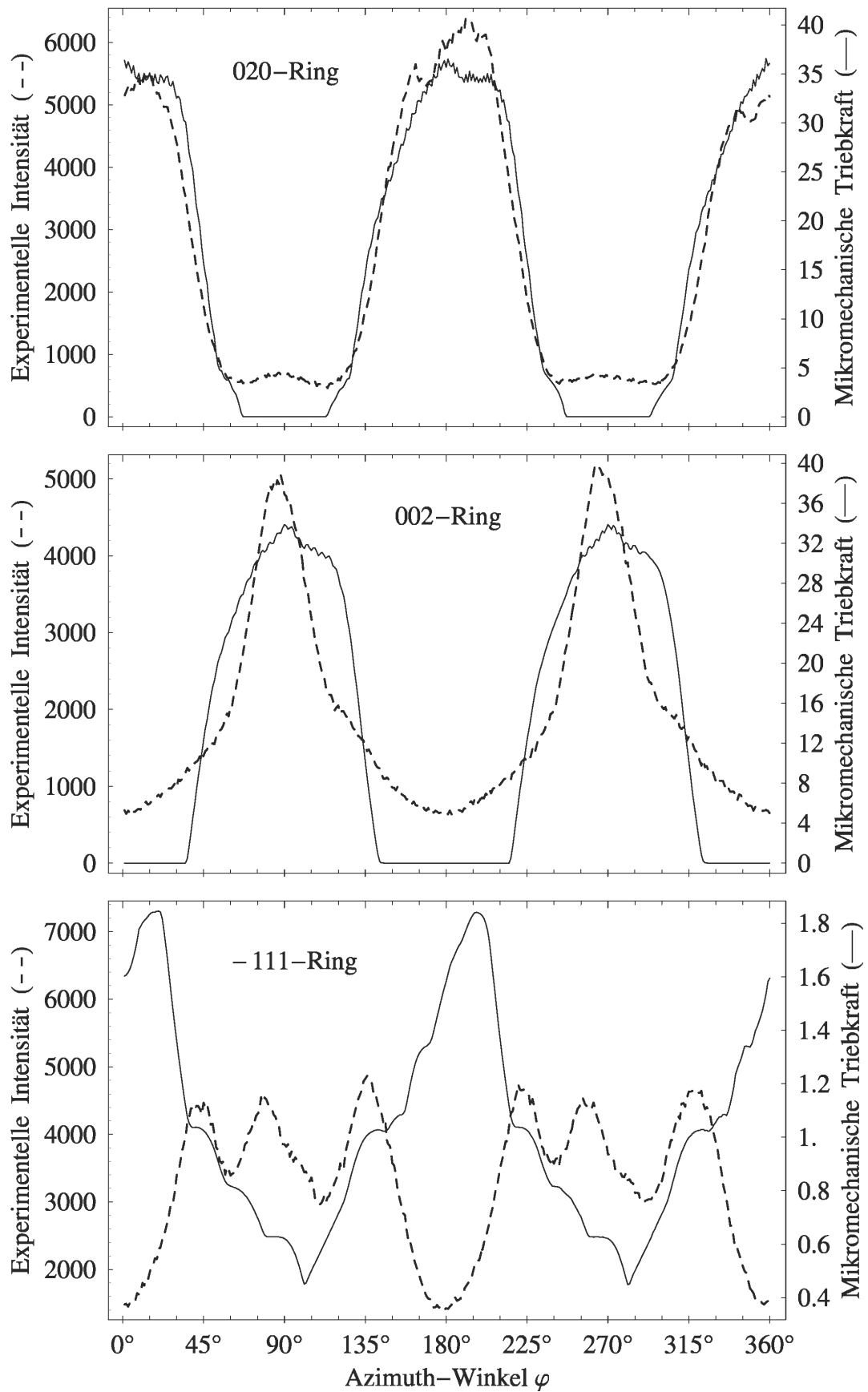


Abbildung 4.25.: Vergleich zwischen experimentell gemessenen und analytisch abgeschätzten Orientierungsdichteverteilungen, belastet orthogonal zur Walzrichtung, $k_2 = 0, 2$, $k_3 = 0, 92$.

5. Zusammenfassung und Ausblick

Die in dieser Arbeit vorgestellten Ergebnisse haben gezeigt, dass sich durch mikromechanische Modellierung wesentliche Aspekte des Materialverhaltens von Formgedächtnislegierungen abbilden lassen. Hierbei wurde eine begrenzte Anzahl physikalisch gut motivierter und experimentell messbarer Parameter verwendet. Insofern bauen die hier dargestellten Materialmodelle im Wesentlichen induktiv auf gut etablierte kristallographische Erkenntnisse auf.

Im Gegensatz hierzu stehen deduktive rein phänomenologische Modelle, die sich darum bemühen, das experimentell beobachtete Materialverhalten durch geeignete Gleichungen unter Anpassung einer häufig recht großen Anzahl von Parametern abzubilden. Phänomenologische Modelle sind in der Regel von ihrer numerischen Implementierung und Verarbeitung her wesentlich leichter zu handhaben und daher für die Simulation komplexerer Bauteile letztendlich zu bevorzugen. Um die grundlegenden Prozesse im Material zu verstehen, sind sie allerdings wenig geeignet, da für derartige Modelle das genaue Materialverhalten a priori bekannt sein muss.

Ein wesentliches Ergebnis dieser Arbeit ist die Bestätigung der *Reuß*-Grenze als geeignete Abschätzung der freien Energiedichte martensitisch transformierender Materialien. Durch Annahme einer verzwilligten laminaren Mikrostruktur wurde eine obere Grenze hergeleitet, welche die untere Grenze nahezu erreicht. Mittels geeigneter numerischer Methoden wurde diese Beobachtung auch bezüglich der energieminimierenden Volumenanteile von Austenit und Martensit bestätigt.

Aufbauend auf diesen Ergebnissen wurde des Weiteren ein Modell zur Erfassung des Materialverhaltens polykristalliner Formgedächtnismaterialien erarbeitet, welches auch die Einflüsse von elastischer Anisotropie, Vortexturen, wie sie im Walzprozess entstehen, und unterschiedlichen elastischen Konstanten von Austenit zu Martensit berücksichtigt.

Bei den Betrachtungen der Eigenschaften polykristalliner Werkstoffe wurde die *Reuß*-Grenze als Abschätzung für die elastische Energie verwendet, da sich am Einkristall gezeigt hat, dass diese der tatsächlichen, quasikonvexen Energiedichte recht nahe kommt. Ob dieser nahe liegende Schluss so zweifelsfrei zutreffend ist, bleibt noch zu prüfen. Zu diesem Zweck bietet sich ein Vergleich der unteren *Reuß*-Grenze für Polykristalle mit oberen Grenzen auf Basis der zuvor vorgestellten Laminatgrenze zweiter Ordnung eingesetzt in die in Smyshlyaev and Willis (1998a) vorgeschlagenen Abschätzungen an.

Auf der Basis der hier präsentierten Ergebnisse ist zunächst die Untersuchung der Möglichkeit, durch äußere Belastung die rhomboedrische R-Phase zu bilden, denkbar. Weiterhin eignet sich das in dieser Arbeit eingeführte Polykristallmodell prinzipiell für eine Implementierung im Rahmen der Finite-Elemente-Methode. So könnte die Betrachtung unter anderem von rein dehnungsgesteuerten numerischen Berechnungen auf spannungsgesteuerte erweitert werden, was einen besseren Vergleich zu experimentellen Ergebnissen ermöglicht.

chen würde.

A. Mathematische Kriterien für die Existenz von Energieminima

In diesem Anhang sollen mathematische Konzepte eingeführt und insbesondere der Begriff der Quasikonvexität näher erläutert werden. Eine ausführlichere Darstellung der hier vorgestellten Betrachtungen ist beispielsweise in Heinen (2004b) zu finden. Die Quasikonvexität als stärkste notwendige Bedingung für die Existenz von Energieminima von Potentialen, wie sie in der Kontinuumsmechanik betrachtet werden, dient in Kap. 3 auch als Ausgangspunkt für die Herleitung der so genannten Mischenergie.

In Abhängigkeit von den in einer verformten Konfiguration wirkenden Verschiebungen \mathbf{u} und dem zugehörigen Deformationsgradiententensor $\mathbf{F} = \nabla \mathbf{u} + \mathbf{I}$ kann das Gesamtpotential Π eines typischen Problems aus der Kontinuumsmechanik wie folgt formuliert werden:

$$\Pi(\mathbf{u}) = \int_{\Omega} \Psi(\mathbf{F}) dV - l(\mathbf{u}) + k \quad \text{mit } \mathbf{u} = \mathbf{0} \text{ auf } \Gamma_{\mathbf{u}}, \quad (\text{A.1})$$

wobei $l(\mathbf{u})$ ein linearer Term in \mathbf{u} und $\Gamma_{\mathbf{u}}$ derjenige Teil der Berandung des vom Körper eingenommenen Gebiets Ω ist, auf welchem die Verschiebung vorgeschrieben ist. Die Konstante k ist für die Minimierung des Gesamtpotentials nicht von Bedeutung und kann daher im Folgenden vernachlässigt werden.

Die Herleitung von Gleichung (A.1) aus der bekannteren Form

$$\Pi(\phi) = \int_{\Omega} \Psi(\mathbf{F}) dV - \int_{\Omega} \mathbf{q} \cdot \phi dV - \int_{\Gamma_{\sigma}} \mathbf{t} \cdot \phi dA \quad \text{mit } \phi - \mathbf{x} = \mathbf{u}^* \text{ auf } \Gamma_{\mathbf{u}} \quad (\text{A.2})$$

ist in Heinen (2004b) dargestellt. In Gl. (A.2) ist ϕ die Abbildung der Koordinaten \mathbf{X} der Ausgangskonfiguration auf die Koordinaten \mathbf{x} der verformten Konfiguration, \mathbf{q} ist die Volumenkräftdichte, die in Ω wirkt, und \mathbf{t} steht für die Oberflächenkräfte, die auf dem Rand Γ_{σ} vorgeschrieben sind.

Nach dem Prinzip des Minimums des Gesamtpotentials ist (A.1) für die tatsächliche Deformation minimal. Es stellt sich daher die Frage, unter welchen Bedingungen ein solches Potential überhaupt ein Minimum besitzt. Umfangreiche mathematische Beweise, wie sie unter anderem in Morrey (1952) und Dacorogna (1982) zu finden sind, zeigen, dass hierfür folgende drei Kriterien erfüllt sein müssen:

- **Beschränktheit:** Ein Potential heißt beschränkt, wenn es ein $a > 0$ und ein $p \geq 1$ gibt, so dass gilt:

$$|\Psi(\mathbf{F})| \leq a(1 + \|\mathbf{F}\|^p) \quad \text{mit } \|\mathbf{F}\| = \sqrt{(F_{ij}F_{ij})}. \quad (\text{A.3})$$

Diese Bedingung ist recht leicht zu überprüfen und für die meisten Potentiale erfüllt. Sie verhindert zu starke Anstiege oder Sprünge im Potential. Im Falle der in dieser

Arbeit verwendeten Energieformulierung handelt es sich im Wesentlichen um eine quadratische Form der Energiedichte, siehe auch Gleichungen (3.1) und (3.2). Wie man leicht erkennt, ist hierfür die Beschränktheit erfüllt.

- **Koerzivität:** Ein Potential heißt koerziv, wenn es ein E , ein $D > 0$ und ein $q > 1$ gibt, so dass gilt:

$$\Psi(\mathbf{F}) \geq E + D \|\mathbf{F}\|^q . \quad (\text{A.4})$$

Dies ist erforderlich, um zu verhindern, dass die Funktion $\int_{\Omega} \Psi(\mathbf{F}) dV$ für große Verzerrungen nach Abzug der linearen Funktion $l(\mathbf{v})$ fällt, wodurch das Energieminimum im Unendlichen läge. Da der Parameter q stets größer als 1 sein muss, wird das Auftreten dieses Phänomens durch die Koerzivität ausgeschlossen. Auch diese Bedingung ist für die in der vorliegenden Arbeit verwendete quadratische Formulierung der Energiedichte erfüllt.

- **Quasikonvexität:** Ein Potential heißt quasikonvex, wenn für jedes beschränkte Gebiet ω und jede Störung φ des Verschiebungsfeldes, welche die homogenen Randbedingungen $\varphi = \mathbf{0}$ auf dem Rand $\partial\omega$ erfüllt, gilt:

$$\Psi(\mathbf{F}) \leq \frac{1}{\|\omega\|} \int_{\omega} \Psi(\mathbf{F} + \nabla\varphi) dV . \quad (\text{A.5})$$

Durch die Bedingung der Quasikonvexität wird sichergestellt, dass homogene Verzerrungszustände stets ein niedrigere freie Energie haben müssen als inhomogene. Es kann bewiesen werden, dass es zur Überprüfung der Quasikonvexität ausreicht, die obige Bedingung für ein beliebiges beschränktes Gebiet ω nachzuweisen. Gelingt dies, so folgt daraus die Erfüllung der Gleichung für alle beschränkten Gebiete im Körper. Aufgrund dieser Überlegung lässt sich das Quasikonvexitätskriterium umformulieren zu:

$$\Psi(\mathbf{F}) \leq \int_{[0,1]^d} \Psi(\mathbf{F} + \nabla\varphi) dV , \quad (\text{A.6})$$

wobei $[0, 1]^d$ den Einheitswürfel in der dem Problem entsprechenden Dimension darstellt. Die so umformulierte Gleichung muss für alle *periodischen stetigen* Störungen φ auf $\partial\omega$ gelten. Die in dieser Arbeit verwendete Energiedichte nach Gleichungen (3.1) und (3.2) ist zunächst nicht quasikonvex. Die Materialantwort hierauf besteht in der Ausbildung von Mikrostrukturen, die in Kapitel 3 näherungsweise durch Abschätzung der so genannten *quasikonvexen Hülle* berechnet werden.

Während die ersten beiden Bedingungen recht leicht zu überprüfen sind, lässt sich die Quasikonvexität zwar für viele Potentiale durch ein Gegenbeispiel verneinen, es ist aber im Allgemeinen nicht möglich, Quasikonvexität direkt nachzuweisen, da hierzu eine Überprüfung aller möglichen Störungen notwendig wäre. Es werden daher andere Konvexitätsbegriffe betrachtet, die oft einfacher zu überprüfen sind und mit Hilfe derer Quasikonvexität bewiesen oder widerlegt werden kann:

- **Konvexität:** Wenn für alle \mathbf{A} , \mathbf{B} und λ mit $0 \leq \lambda \leq 1$

$$\Psi(\lambda\mathbf{A} + (1 - \lambda)\mathbf{B}) \leq \lambda\Psi(\mathbf{A}) + (1 - \lambda)\Psi(\mathbf{B}) \quad (\text{A.7})$$

bzw.

$$\Psi(\mathbf{A}) \leq \lambda \Psi(\mathbf{A} + (1 - \lambda)\mathbf{B}) + (1 - \lambda) \Psi(\mathbf{A} - \lambda\mathbf{B}) \quad (\text{A.8})$$

gilt, heißt ein Potential konvex. Dieser strengste der Konvexitätsbegriffe schließt alle anderen (und somit auch die Quasikonvexität) ein. Allerdings handelt es sich nicht um ein notwendiges Kriterium für Quasikonvexität.

- **Polykonvexität:** Der nächst schwächere Konvexitätsbegriff ist die Polykonvexität, welche genau dann erfüllt ist, wenn es eine *konvexe* Funktion f gibt mit:

$$\Psi(\mathbf{F}) = f(\mathbf{F}, \text{Cof } \mathbf{F}, \text{Det } \mathbf{F}), \text{ wobei } \text{Cof } \mathbf{F} := (\text{Det } \mathbf{F}) \cdot \mathbf{F}^{-T}. \quad (\text{A.9})$$

Polykonvexität schließt *Quasikonvexität* ebenfalls ein und wird daher häufig zum Nachweis derselben verwendet.

- **Rang-1-Konvexität:** Eine Funktion heißt Rang-1-konvex, wenn die *Konvexitätsbedingung* nach Gleichung (A.7) bzw. (A.8) für alle \mathbf{A} und \mathbf{B} mit der Nebenbedingung $\text{Rang}(\mathbf{A} - \mathbf{B}) \leq 1$ gilt. Dies entspricht der Überprüfung der Quasikonvexität nur für *Laminate erster Ordnung*. Eine alternative Formulierung der Rang-1-Konvexität ist die *Cauchy-Hadamard-Bedingung*:

$$(\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) : \frac{\partial^2 \Psi}{\partial \mathbf{F}^2} : (\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}) \geq 0 \quad \forall \mathbf{F}, \mathbf{a}, \mathbf{b}. \quad (\text{A.10})$$

Rang-1-Konvexität ist für Quasikonvexität zwar notwendig, aber nicht hinreichend. Dies wurde in Šverák (1992) durch folgendes Gegenbeispiel bewiesen:

$$\Psi(\mathbf{A}) = f(\mathbf{A}) + \varepsilon \|\mathbf{A}\|^2 + \varepsilon \|\mathbf{A}\|^4 + k \|\mathbf{A} - \mathbf{P} : \mathbf{A}\|^2, \quad (\text{A.11})$$

wobei $f(\mathbf{A}) = -A_{11}A_{22}(A_{31} + A_{32})$

$$\text{und } \mathbf{P} : \mathbf{A} = \begin{pmatrix} A_{11} & 0 \\ 0 & A_{22} \\ A_{31} + A_{32} & A_{31} + A_{32} \end{pmatrix}$$

Dieses Potential ist für gewisse k und ε Rang-1-konvex, aber nicht quasikonvex. Es entspricht allerdings keinem physikalisch realisierbaren Material – allein schon deswegen, weil es nicht kovariant ist, weil der Wert des Potentials also vom Betrachter abhängt.

Die Suche nach kovarianten Potentialen, die zwar Rang-1-konvex, aber nicht quasikonvex sind, ist ein Thema noch andauernder Forschung in diesem Gebiet.

In Abb. A.1 sind hier erwähnten Konvexitätsbegriffe nochmals schematisch dargestellt.

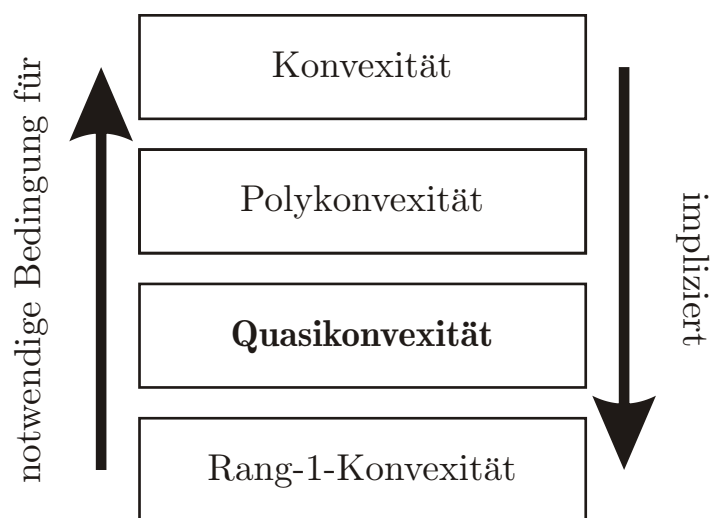


Abbildung A.1.: Schematische Darstellung der Konvexitätsbegriffe.

B. Materialdaten

B.1. Kubisch \leftrightarrow tetragonal transformierendes NiAl

Die Materialdaten für kubisch zu tetragonal transformierendes Ni-36,8Al sind Bhattacharya and Kohn (1996) entnommen. Der Elastizitätstensor wird als näherungsweise isotrop und für alle Varianten identisch angenommen und ist durch die Lamé-Konstanten $\lambda = 97,8$ GPa und $\mu = 53,6$ GPa definiert. Die Transformationsdehnungen dieses Materials zeigt Tab. B.1, wobei die in Kap. 2.2 vorgestellte tetragonale Variante hier als η_2 zu finden ist. Die in Tab. B.1 verwendeten Parameter haben die Werte $\bar{\alpha} = -0,0608$ und $\bar{\beta} = 0,1302$.

Austenitische Transformationsdehnung
$\eta_0 = \mathbf{0}$
Martensitische Transformationsdehnungen
$\eta_1 = \begin{pmatrix} \bar{\beta} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{\alpha} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\alpha} \end{pmatrix}$
$\eta_2 = \begin{pmatrix} \bar{\alpha} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{\beta} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\alpha} \end{pmatrix}$
$\eta_3 = \begin{pmatrix} \bar{\alpha} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{\alpha} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\beta} \end{pmatrix}$

Tabelle B.1.: Transformationsdehnungen für kubisch zu tetragonal transformierendes NiAl

B.2. Kubisch \leftrightarrow orthorhombisch transformierendes CuAlNi

Die im Rahmen dieser Arbeit verwendeten Materialdaten für kubisch zu orthorhombisch transformierendes CuAlNi gehen auf Sedláč et al. (2005) zurück.

Die anisotropen elastischen Konstanten für die Austenitphase sind $C_{11} = 142,38 \text{ GPa}$, $C_{12} = 124,10 \text{ GPa}$ und $C_{44} = 95,24 \text{ GPa}$. Aufgrund der kubischen Symmetrie des Austenits ist die Angabe dieser drei Konstanten ausreichend.

Im Falle des Martensits liegt eine geringere Symmetrie vor. Aus diesem Grund müssen hier neun verschiedene Materialkonstanten angegeben werden: $C_{11} = 184,46 \text{ GPa}$, $C_{22} = 151,45 \text{ GPa}$, $C_{33} = 238,58 \text{ GPa}$, $C_{44} = 66,39 \text{ GPa}$, $C_{55} = 22,85 \text{ GPa}$, $C_{66} = 60,55 \text{ GPa}$, $C_{23} = 86,83 \text{ GPa}$, $C_{13} = 70,09 \text{ GPa}$ und $C_{12} = 140,41 \text{ GPa}$.

Die Transformationsdehnungen des orthorhombischen Martensits sind durch die drei Parameter $\bar{\alpha} = 0,0657501$, $\bar{\beta} = -0,0810031$ und $\bar{\gamma} = 0,0239604$ definiert. Damit ergeben sich die in Tab. B.2 angegebenen linearisierten Dehnungstensoren. Die in Kapitel 2.2 hergeleitete Transformationsdehnung ist hierin als η_5 zu finden.

Austenitische Transformationsdehnung		
$\eta_0 = \mathbf{0}$		
Martensitische Transformationsdehnungen		
$\eta_1 = \begin{pmatrix} \bar{\beta} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\bar{\alpha}+\bar{\gamma}}{2} & \frac{\bar{\gamma}-\bar{\alpha}}{2} \\ 0 & \frac{\bar{\gamma}-\bar{\alpha}}{2} & \frac{\bar{\alpha}+\bar{\gamma}}{2} \end{pmatrix}$	$\eta_2 = \begin{pmatrix} \bar{\beta} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{\bar{\alpha}+\bar{\gamma}}{2} & \frac{\bar{\alpha}-\bar{\gamma}}{2} \\ 0 & \frac{\bar{\alpha}-\bar{\gamma}}{2} & \frac{\bar{\alpha}+\bar{\gamma}}{2} \end{pmatrix}$	$\eta_3 = \begin{pmatrix} \frac{\bar{\alpha}+\bar{\gamma}}{2} & 0 & \frac{\bar{\gamma}-\bar{\alpha}}{2} \\ 0 & \bar{\beta} & 0 \\ \frac{\bar{\gamma}-\bar{\alpha}}{2} & 0 & \frac{\bar{\alpha}+\bar{\gamma}}{2} \end{pmatrix}$
$\eta_4 = \begin{pmatrix} \frac{\bar{\alpha}+\bar{\gamma}}{2} & 0 & \frac{\bar{\alpha}-\bar{\gamma}}{2} \\ 0 & \bar{\beta} & 0 \\ \frac{\bar{\alpha}-\bar{\gamma}}{2} & 0 & \frac{\bar{\alpha}+\bar{\gamma}}{2} \end{pmatrix}$	$\eta_5 = \begin{pmatrix} \frac{\bar{\alpha}+\bar{\gamma}}{2} & \frac{\bar{\gamma}-\bar{\alpha}}{2} & 0 \\ \frac{\bar{\gamma}-\bar{\alpha}}{2} & \frac{\bar{\alpha}+\bar{\gamma}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\beta} \end{pmatrix}$	$\eta_6 = \begin{pmatrix} \frac{\bar{\alpha}+\bar{\gamma}}{2} & \frac{\bar{\alpha}-\bar{\gamma}}{2} & 0 \\ \frac{\bar{\alpha}-\bar{\gamma}}{2} & \frac{\bar{\alpha}+\bar{\gamma}}{2} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\beta} \end{pmatrix}$

Tabelle B.2.: Transformationsdehnungen für kubisch zu orthorhombisch transformierendes CuAlNi

B.3. Kubisch \leftrightarrow monoklin transformierendes CuAlNi

Die Materialdaten für kubisch zu monoklin-II transformierendes, und damit dreizehn-variantes, Cu-14Al-4Ni stammen aus Otsuka et al. (1974): E-Modul $E = 20,6 \cdot 10^9 \text{N/m}^2$, Querkontraktionszahl $\nu = 0,25$, Transformationsdehnungen: siehe Tab. B.3 mit $\bar{\alpha} = 0,0436$, $\bar{\beta} = -0,0822$, $\bar{\delta} = 0,0170$ und $\bar{\epsilon} = 0,0508$.

Austenitische Transformationsdehnungen		
$\eta_0 = 0$		
Martensitische Transformationsdehnungen		
$\eta_1 = \begin{pmatrix} \bar{\alpha} + \bar{\epsilon} & \bar{\delta} & 0 \\ \bar{\delta} & \bar{\alpha} - \bar{\epsilon} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\beta} \end{pmatrix}$	$\eta_2 = \begin{pmatrix} \bar{\alpha} + \bar{\epsilon} & -\bar{\delta} & 0 \\ -\bar{\delta} & \bar{\alpha} - \bar{\epsilon} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\beta} \end{pmatrix}$	$\eta_3 = \begin{pmatrix} \bar{\alpha} - \bar{\epsilon} & \bar{\delta} & 0 \\ \bar{\delta} & \bar{\alpha} + \bar{\epsilon} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\beta} \end{pmatrix}$
$\eta_4 = \begin{pmatrix} \bar{\alpha} - \bar{\epsilon} & -\bar{\delta} & 0 \\ -\bar{\delta} & \bar{\alpha} + \bar{\epsilon} & 0 \\ 0 & 0 & \bar{\beta} \end{pmatrix}$	$\eta_5 = \begin{pmatrix} \bar{\alpha} + \bar{\epsilon} & 0 & \bar{\delta} \\ 0 & \bar{\beta} & 0 \\ \bar{\delta} & 0 & \bar{\alpha} - \bar{\epsilon} \end{pmatrix}$	$\eta_6 = \begin{pmatrix} \bar{\alpha} + \bar{\epsilon} & 0 & -\bar{\delta} \\ 0 & \bar{\beta} & 0 \\ -\bar{\delta} & 0 & \bar{\alpha} - \bar{\epsilon} \end{pmatrix}$
$\eta_7 = \begin{pmatrix} \bar{\alpha} - \bar{\epsilon} & 0 & \bar{\delta} \\ 0 & \bar{\beta} & 0 \\ \bar{\delta} & 0 & \bar{\alpha} + \bar{\epsilon} \end{pmatrix}$	$\eta_8 = \begin{pmatrix} \bar{\alpha} - \bar{\epsilon} & 0 & -\bar{\delta} \\ 0 & \bar{\beta} & 0 \\ -\bar{\delta} & 0 & \bar{\alpha} + \bar{\epsilon} \end{pmatrix}$	$\eta_9 = \begin{pmatrix} \bar{\beta} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{\alpha} + \bar{\epsilon} & \bar{\delta} \\ 0 & \bar{\delta} & \bar{\alpha} - \bar{\epsilon} \end{pmatrix}$
$\eta_{10} = \begin{pmatrix} \bar{\beta} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{\alpha} + \bar{\epsilon} & -\bar{\delta} \\ 0 & -\bar{\delta} & \bar{\alpha} - \bar{\epsilon} \end{pmatrix}$	$\eta_{11} = \begin{pmatrix} \bar{\beta} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{\alpha} - \bar{\epsilon} & \bar{\delta} \\ 0 & \bar{\delta} & \bar{\alpha} + \bar{\epsilon} \end{pmatrix}$	$\eta_{12} = \begin{pmatrix} \bar{\beta} & 0 & 0 \\ 0 & \bar{\alpha} - \bar{\epsilon} & -\bar{\delta} \\ 0 & -\bar{\delta} & \bar{\alpha} + \bar{\epsilon} \end{pmatrix}$

Tabelle B.3.: Transformationsdehnungen für kubisch zu monoklin-II transformierendes CuAlNi.

C. Notation

In dieser Arbeit wurde folgende Notation verwendet:

Für lateinische Kleinbuchstaben als Indices gilt die Einstein'sche Summationskonvention, wann immer diese also in einem Produkt doppelt auftreten, ist darüber von 1 bis zur räumlichen Dimension d zu summieren.

Demzufolge wäre z.B. im \mathbb{R}^3 : $A_{ij}B_{jk} = \sum_{j=1}^3 A_{ij}B_{jk} = A_{i1}B_{1k} + A_{i2}B_{2k} + A_{i3}B_{3k}$.

Im Folgenden sind die wichtigsten Bezeichnungen und Symbole aufgelistet:

a	Kleinbuchstaben stehen für Skalare.
a_i	Indizierte Kleinbuchstaben stehen für Vektorkomponenten.
A_{ij}	Mehrfach indizierte Großbuchstaben stehen für Komponenten von Tensoren höherer Stufe.
\mathbf{a}	Fettgedruckte Kleinbuchstaben stehen für Vektoren.
\mathbf{A}	Fettgedruckte Großbuchstaben stehen für Dyaden.
$\mathbf{a} \cdot \mathbf{b}$	$= a_i b_i$, Skalarprodukt zweier Vektoren.
$\mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$	$= A_{ij} B_{jk} \mathbf{e}_i \mathbf{e}_k$, Skalarprodukt zweier Tensoren. Die Bezeichnung <i>Skalarprodukt</i> bezieht sich zwar auf das Ergebnis des Produktes zweier Vektoren, ist aber auch bei Tensoren gebräuchlich.
$\mathbf{A} : \mathbf{B}$	$= A_{ij} B_{ij}$, doppeltes Skalarprodukt zweier Tensoren.
$\mathbf{a} \times \mathbf{b}$	Vektorprodukt zweier Vektoren.
\mathbf{ab}	$= a_i b_j \mathbf{e}_i \mathbf{e}_j$, dyadisches Produkt zweier Vektoren.
$\mathbf{a} \otimes \mathbf{b}$	$= \mathbf{ab}$, dyadisches Produkt zweier Vektoren, alternative Schreibweise.
$\mathbf{a} \otimes^s \mathbf{b}$	$= 1/2 (\mathbf{ab} + \mathbf{ba})$, symmetrisches dyadisches Produkt zweier Vektoren.
\mathbf{A}^T	$= A_{ij} \mathbf{e}_j \mathbf{e}_i$, Transponierte eines Tensors.
\mathbf{A}^{-1}	Inverse eines Tensors, definiert über $\mathbf{A} \cdot \mathbf{A}^{-1} = \mathbf{I}$.
∇	$= \partial / \partial X_i \mathbf{e}_i$, Nabla-Operator.
$\nabla^s \mathbf{a}$	$= 1/2 (\nabla \mathbf{a} + \mathbf{a} \nabla)$, symmetrischer Gradient.
$\dot{\mathbf{a}}$	Zeitableitung von \mathbf{a} .
$\ \mathbf{A}\ $	$= \sqrt{A_{ij} A_{ij}}$ Vektor-/Tensornorm.
\forall	„für alle“.
$\text{dev}_{\mathcal{A}q}$	Aktiver Deviator.
\mathcal{A}	Aktive Menge.
\mathcal{B}	Passive Menge.
\mathbf{C}	$\mathbf{F}^T \cdot \mathbf{F}$, rechter Cauchy-Green Tensor.
\mathbf{c}	Volumenanteilsvektor.
$\mathbf{c}^{(i)}$	$= (c_0 + \dots + c_i)^{-1} (c_0 \mathbf{i}_0 + \dots + c_i \mathbf{i}_i)$.
\mathbb{C}	Materialtensor vierter Stufe.
d	Räumliche Dimension des betrachteten Problems.
d_K	Volumenanteil K ter Zwilling an Mikrostruktur.

\mathbf{d}_K	$= \sum_{J=0}^K d_J \boldsymbol{\theta}_J / \sum_{J=0}^K d_J$.
\mathbf{d}^k	Suchrichtung.
E	Elastizitätsmodul.
\mathbf{E}	$1/2 (\mathbf{C} - \mathbf{I})$, Green-Lagrange'scher Verzerrungstensor.
\mathbf{e}_i	i ter Einheitsvektor im dreidimensionalen Raum.
\mathbf{F}	$\partial \mathbf{x} / \partial \mathbf{X}$, Deformationsgradiententensor.
$\mathbf{G}(\boldsymbol{\omega})$	$= 1/2 (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbb{C} : \boldsymbol{\eta}_k) \cdot \mathbf{T}(\boldsymbol{\omega})^{-1} \cdot (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbb{C} : \boldsymbol{\eta}_l) \mathbf{i}_k \mathbf{i}_l$.
$g(\mathbf{c}^k, \mathbf{d}^k)$	Steigung in Richtung von \mathbf{d}^k am Punkt \mathbf{c}^k .
g_k	Kuhn-Tucker Bedingung.
\mathbb{H}	\mathbb{H} -Maß.
\mathbf{I}	$= \mathbf{e}_i \mathbf{e}_i$, Einheitstensor.
i	$= \sqrt{-1}$, imaginäre Einheit.
\mathbf{i}_i	i ter Einheitsvektor im $n + 1$ -dimensionalen Variantenraum.
i	Index, läuft von 0 (Austenitvariante) bis n .
j	Index, läuft von 1 bis N .
M	$= n/2$, Anzahl der möglichen Zwillinge.
N	Anzahl der betrachteten Kristallorientierungen.
n	Anzahl der martensitischen Varianten.
\mathbf{n}	Normaleneinheitsvektor.
\mathbf{p}	Volumenkraftdichte.
$\mathcal{P}_{\text{pure}}^{n+1}$	$= \{(1, 0, \dots, 0)^T, (0, 1, \dots, 0)^T, \dots, (0, \dots, 0, 1)^T\}$, Menge aller reinen Varianten.
$Q\Psi$	Quasikonvexifizierte Energiedichte.
Q^d	Einheitswürfel der Dimension d .
\mathbf{q}	Zu $\dot{\mathbf{c}}$ thermodynamisch konjugierte Triebkraft.
q	Texturexponent.
\mathbf{R}	Rotationstensor, $\mathbf{R} \cdot \mathbf{R}^T = \mathbf{R}^T \cdot \mathbf{R} = \mathbf{I}$, $\det \mathbf{R} = 1$.
Re	Realteil.
\mathbb{R}	Menge aller reellen Zahlen.
r	Dissipationsparameter.
s	Schrittweite.
\mathbf{T}	Akustiktensor, definiert durch $\mathbf{u} \cdot \mathbf{T}(\boldsymbol{\omega}) \cdot \mathbf{u} = (\boldsymbol{\omega} \otimes^s \mathbf{u}) : \mathbb{C} : (\boldsymbol{\omega} \otimes^s \mathbf{u})$.
\mathbf{U}	Rechter Strecktensor mit $\mathbf{F} = \mathbf{R} \cdot \mathbf{U}$.
\mathbf{u}	$= \mathbf{x} - \mathbf{X}$, Verschiebung.
\mathbf{X}	Koordinaten im Referenzzustand.
\mathbf{x}	Koordinaten im verformten Zustand.
\mathbb{Z}	Menge aller ganzen Zahlen.
α_i	Chemische Energie, Variante j .
β^j	Lagrange-Parameter.
$\boldsymbol{\chi}$	Schaltvektor, der angibt, welche Variante an einem bestimmtem Ort aktiv ist.
Δ	Dissipationsfunktion.
ϵ	Kleine Störung zur Bestimmung numerischer Gradienten.
ϵ_{ijk}	Levi-Civita-Permutationssymbol.
$\boldsymbol{\epsilon}$	(Linearisierter Green-Lagrange'scher) Dehnungstensor.
Φ	„Fließfunktion“.
φ	Azimut-Winkel.
φ	Verschiebungsfluktuationsfeld.

ϕ	$= \inf \{ -\mathbf{G}(\boldsymbol{\omega}) : (\boldsymbol{\kappa} \otimes \boldsymbol{\kappa}) \boldsymbol{\omega} \in \mathbb{S}^{d-1} \}$, Minimierungsfunktion.
γ_i^j	Kuhn-Tucker Parameter.
$\boldsymbol{\eta}$	(Linearisierte) Bain- oder Transformationsdehnung.
λ	Lamé-Konstante.
λ_i	Eigenwerte.
μ	Lamé-Konstante.
ν	Querkontraktionszahl.
Π	Gesamtpotential.
θ	Volumenanteil der ersten Variante eines Zwillings bzw. Kugelkoordinate.
$\boldsymbol{\theta}$	Normierter Phasenanteilsvektor eines Zwillings.
ρ	Skalierparameter.
$\boldsymbol{\sigma}$	Spannungstensor.
$\boldsymbol{\xi}$	Vektorwertiger Index komplexer Fourier-Koeffizienten.
ξ	Young-Maß.
ξ^j	Volumenanteil j ter Kristallit.
Ψ	Helmholtz'sche freie Energiedichte.
ψ_{lam}	Laminatgrenze zweiter Ordnung.
ψ_{lam}^*	Laminatgrenze erster Ordnung.
ψ_{mix}	Mischenergie.
$\psi_{\text{Reuß}}$	Untere Reuß-Grenze für die Mischenergie.
$\boldsymbol{\omega}$	Richtungsvektor.

Literaturverzeichnis

- Altenbach, J. and H. Altenbach (1994). *Einführung in die Kontinuumsmechanik*. Teubner.
- Avellaneda, M. and G. Milton (1989). Bounds on the effective elasticity tensor of composites based on two-point correlations. In D. Hui and T. Koszic (Eds.), *Proceedings of the ASME Energy-Technology Conference and Exposition*. ASME.
- Ball, J. M. and R. D. James (1987). Fine phase mixtures as minimizers of energy. *Arch. Rat. Mech. Anal.* 100, 13–52.
- Bhattacharya, K. (2003). *Microstructure of Martensite. Why it forms and how it gives rise to the shape-memory effect*. Oxford University Press.
- Bhattacharya, K. and R. Kohn (1996). Symmetry, texture and the recoverable strain of shape-memory polycrystals. *Acta Mater.* 44, 529–542.
- Borchardt-Ott, W. (1987). *Kristallographie*. Springer.
- Buerger, M. J. (1977). *Kristallographie*. de Gruyter.
- Chang, L. C. and T. A. Read (1951). Plastic deformation and diffusionless phase changes in metals – the gold-cadmium beta phase. *Trans. AIME J. Metals* 191, 47–52.
- Dacorogna, B. (1982). Quasiconvexity and relaxation of nonconvex problems in the calculus of variations. *J. Funct. Anal.* 46, 102–118.
- Duggin, M. J. and W. A. Rachinger (1964). Nature of martensite transformation in Copper-Nickel-Aluminum alloy. *Acta Metall.* 12, 529.
- Enami, K. and S. Nenno (1971). S. memory effect in Ni-36.8 at. pct. Al martensite. *Metall. Trans.* 2, 1487.
- Geiger, C. and C. Kanzow (1999). *Numerische Verfahren zur Lösung unrestringierter Optimierungsaufgaben*. Springer.
- Govindjee, S., K. Hackl, and R. Heinen (2007). An upper bound to the free energy of mixing by twin-compatible lamination for n -variant martensitic phase transformations. *Continuum Mech. Thermodyn.* 18, 443–453.
- Govindjee, S. and C. Miehe (2001). A multi-variant martensitic phase transformation model: formulation and numerical implementation. *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 191, 215–238.

- Govindjee, S., A. Mielke, and G. J. Hall (2003). The free energy of mixing for n -variant martensitic phase transformations using quasi-convex analysis. *J. Mech. Phys. Solids* 51, 763+.
- Grabe, C. (2007). *Experimental testing and parameter identification on the multidimensional material behavior of shape memory alloys*. Schriftenreihe Institut für Mechanik.
- Grabe, C. and O. T. Bruhns (2007). Tension/torsion tests of pseudoelastic, polycrystalline NiTi shape memory alloys under temperature control. *Mat. Sci. Eng. A in press*.
- Gurtin, M. E. (1981). *An introduction to continuum mechanics*. Academic Press.
- Guttman, L. (1950). Crystal structures and transformations in Indium-Thallium solid solutions. *Trans. AIME J. Metals* 188, 1472 – 1477.
- Hackl, K. and R. Heinen (2007). A micromechanical model for pre-textured polycrystalline shape memory alloys including elastic anisotropy. *Contin. Mech. Thermodyn. eingereicht*.
- Hackl, K., R. Heinen, W. W. Schmahl, and M. Hasan (2006). Experimental verification of a micromechanical model for polycrystalline shape memory alloys in dependence of martensite orientation distributions. *Mat. Sci. Eng. A im Druck*.
- Hackl, K. and U. Hoppe (2003). On the calculation of microstructures for inelastic materials using relaxed energies. In C. Miehe (Ed.), *IUTAM Symposium on Computational Mechanics of Solid Materials at Large Strains*, pp. 77–86. Kluwer, Boston.
- Hall, G. J. and S. Govindjee (2001). Application of a partially relaxed shape memory free energy function to estimate the phase diagram and predict global microstructure evolution. *J. Mech. Phys. Solids* 50, 501–530.
- Hall, G. J. and S. Govindjee (2002). Application of the relaxed free energy of mixing to problems in shape memory alloy simulation. *J. Intelligent Mat. Sys. Struct.* 13, 773–782.
- Hasan, M., W. W. Schmahl, K. Hackl, R. Heinen, J. Frenzel, S. Gollerthan, G. Eggeler, M. Wagner, and J. Khalil-Allafi (2007). Hard x-ray studies of stress-induced phase transformations of superelastic NiTi shape memory alloys under uniaxial load. *Mat. Sci. Eng. A eingereicht*.
- Heinen, R. (2004a). *Computation of Upper Bounds in Quasi-Convex Modeling of Martensitic Transformations*. Diplomarbeit, University of California, Berkeley und Ruhr-Universität Bochum.
- Heinen, R. (2004b). *Eine Untersuchung der Konvexitätseigenschaften kovarianter Potentiale mittels globaler Optimierung*. Studienarbeit, Ruhr-Universität Bochum.
- Heinen, R. and K. Hackl (2007). On the calculation of energy-minimizing phase fractions in shape memory alloys. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 196, 2401–2412.
- Heinen, R., K. Hackl, G. Kotucha, and T. Bartel (2006). A lamination upper bound to the free energy of shape memory alloys. *Proc. Appl. Math. Mech.* 6, 481–482.

- Heinen, R., U. Hoppe, and K. Hackl (2006). Prediction of microstructural patterns in monocrystalline shape memory alloys using global energy minimization. *Mat. Sci. Eng. A. im Druck*.
- Hornbogen, E. (2006). *Werkstoffe*. Springer.
- Hornbogen, E. and G. Wassermann (1956). Über den Einfluß von Spannungen und das Auftreten von Umwandlungsplastizität bei der β_1 - β_2 -Umwandlung des Messings. *Z. Metallkde.* 47, 427–433.
- Kleber, W., H.-J. Bausch, and H. Bohm (1998). *Einführung in die Kristallographie*. Verlag Technik.
- Knowles, K. M. and D. A. Smith (1981). The crystallography of the martensitic transformation in equiatomic nickel-titanium. *Acta Metall.* 29, 101–110.
- Kohn, R. (1991). The relaxation of a double-well problem. *Contin. Mech. Thermodyn.* 3, 193–236.
- Mehrabadi, M. M. and S. C. Cowin (1990). Eigentensors of linear anisotropic elastic materials. *Q. J. Mech. Appl. Math.* 43, 15–41.
- Mielke, A. (2006). A mathematical framework for generalized standard materials in the rate-independent case. In R. Helmig, A. Mielke, and B. Wohlmuth (Eds.), *Multifield problems in solid and fluid mechanics*, pp. 399–428. Springer.
- Morrey, C. B. (1952). Quasiconvexity and the lower semicontinuity of multiple integrals. *Pacific J. Math.* 2, 25–53.
- Ortiz, M. and E. A. Repetto (1999). Nonconvex energy minimization and dislocation structures in ductile single crystals. *J. Mech. Phys. Solids* 47, 397–462.
- Otsuka, K., T. Nakamura, and K. Shimizu (1974). Electron microscopy study of stress induced acicular β' - 1 martensite in cu-al-ni alloy. *Trans. Natl. Res. Inst. Met.* 15, 200–210.
- Otsuka, K. and C. M. Wayman (1999). *Shape Memory Materials*. Cambridge University Press.
- Pipkin, A. C. (1991). Elastic materials with two preferred states. *Q. J. Mech. Appl. Math.* 44, 1–15.
- Polak, E. and G. Ribière (1969). Note sur la convergence de methodes de directions conjuguées. *Rev. Fr. Inf. Rech. Oper.* 16, 35–43.
- Powell, M. J. D. (1970). A new algorithm for unconstrained optimization. In J. B. Rosen, O. L. Mangasarian, and K. Ritter (Eds.), *Nonlinear Programming*, pp. 31–65. Academic Press.

- Roubíček, T. (1997). *Relaxation in Optimization Theory and Variational Calculus*. De Gruyter.
- Schatt, W. and H. Worch (2003). *Werkstoffwissenschaft*. Wiley.
- Schmahl, W., J. Khalil-Allafi, B. Hasse, M. Wagner, A. Heckmann, and C. Somsen (2004). Investigation of the phase evolution in a super-elastic NiTi shape memory alloy (50.7 at.%Ni) under extensional load with synchrotron radiation. *Mat. Sci. Eng. A* 378, 81–85.
- Schmidt-Baldassari, M. (2003). Numerical concepts for rate-independent single crystal plasticity. *Comput. Methods Appl. Mech. Eng.* 192 192, 1261–1280.
- Sedláč, P., H. Seiner, M. Landa, V. Novák, P. Sittner, and L. Manosa (2005). Elastic constants of bcc austenite and 2H orthorhombic martensite in CuAlNi shape memory alloy. *Acta Materialia* 53, 3643–3661.
- Seo, J. W. and D. Schryvers (1998). TEM investigation of the microstructure and defects of CuZr martensite. i. morphology and twin system and ii. planar defects. *Acta Mater.* 46, 1177–1183.
- Smyshlyaev, V. and J. Willis (1998a). A 'non-local' variational approach to the elastic energy minimization of martensitic polycrystals. *Proc. R. Soc. London A* 454, 1573–1613.
- Smyshlyaev, V. and J. Willis (1998b). On the relaxation of a three-well energy. *Proc. R. Soc. London A* 455, 779–814.
- Tartar, L. (1990). H-measures, a new approach for studying homogenization, oscillation and concentration effects in partial differential equations. *Proc. R. Soc. Edinburgh A* 115, 193–230.
- Tokonami, M., K. Otsuka, K. Shimizu, Y. Iwata, and I. Shibuya (1979). Neutron diffraction studies of crystal structures of stress induced martensites in a Cu-Al-Ni alloy. pp. 639–644.
- Truesdell, C. (1985). *The Elements of Continuum Mechanics*. Springer.
- Voigt, W. (1966). *Lehrbuch der Kristallphysik*. Teubner.
- Šverák, V. (1992). Rank-one convexity does not imply quasiconvexity. *Proc. Roy. Soc. Edinburgh* 120, 185–189.
- Zhang, Z. H., J. Frenzel, K. Neuking, X. F. Bian, and G. Eggeler (2006). Homogenization treatments for vim-processed ternary NiTiX (X=Cu, Fe, Zr, Hf) shape memory alloys. *Mat. Sci. Engrg. A*.

Hinweis auf Vorveröffentlichungen

Nach § 7 (1) sei darauf hingewiesen, dass Teile dieser Arbeit in Absprache mit dem Betreuer Prof. Dr. Hackl vorab in englischer Sprache in wissenschaftlichen Fachzeitschriften veröffentlicht wurden. Auf diese Artikel wird an geeigneter Stelle in der Arbeit verwiesen. Im Einzelnen handelt es sich um folgende Publikationen:

- S. Govindjee, K. Hackl, R. Heinen (2007): *An upper bound to the free energy of mixing by twin-compatible lamination for n-variant martensitic phase transformations*, Continuum Mech. Thermodyn. **18**, 443–453.
- R. Heinen, K. Hackl (2007): *On the calculation of energy-minimizing phase fractions in shape memory alloys*, Comput. Methods Appl. Mech. Eng. **196**, 2401–2412.
- R. Heinen, K. Hackl, G. Kotucha, T. Bartel (2006): *A lamination upper Bound to the free energy of shape memory alloys*, Proc. Appl. Math. Mech. **6**, 481–482.
- R. Heinen, U. Hoppe, K. Hackl (2007): *Prediction of microstructural patterns in monocrystalline shape memory alloys using global energy minimization*, Mat. Sci. Eng. A, im Druck.
- K. Hackl, R. Heinen, W.W. Schmahl, M. Hasan (2007): *Experimental verification of a micromechanical model for polycrystalline shape memory alloys in dependence of martensite orientation distributions*, Mat. Sci. Eng. A, im Druck.
- M. Hasan, W. W. Schmahl, K. Hackl, R. Heinen, J. Frenzel, S. Gollerthan, G. Eggeler, M. Wagner, J. Khalil-Allafi (2007): *Hard x-ray studies of stress-induced phase transformations of superelastic NiTi shape memory alloys under uniaxial load*, Mat. Sci. Eng. A, im Druck.
- K. Hackl, R. Heinen (2007): *A micromechanical model for pre-textured polycrystalline shape memory alloys including elastic anisotropy*, Continuum Mech. Thermodyn., eingereicht.

Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik

- Nr. 1 Theodor Lehmann: Dezember 1976
Große elasto-plastische Formänderungen
- Nr. 2 Bogdan Raniecki/Klaus Thermann: Juni 1978
Infinitesimal Thermoplasticity and Kinematics of Finite Elastic-Plastic Deformations.
Basic Concepts
- Nr. 3 Wolfgang Krings: Januar 1976
Beitrag zur Finiten Element Methode bei linearem, viskoelastischem Stoffverhalten
Stoffverhalten
- Nr. 4 Burkhard Lücke: Januar 1976
Theoretische und experimentelle Untersuchungen der zyklischen elastoplastischen Blech-
biegung bei endlichen Verzerrungen
- Nr. 5 Knut Schwarze: Februar 1976
Einfluß von Querschnittsverformungen bei dünnwandigen Stäben mit stetig ge-
krümmter Profilmittellinie
- Nr. 6 Hubert Sommer: Januar 1977
Ein Beitrag zur Theorie des ebenen elastischen Verzerrungszustandes bei endlichen
Formänderungen
- Nr. 7 H. Stumpf/F. J. Biehl: März 1977
Die Methode der orthogonalen Projektionen und ihre Anwendungen zur Berechnung
orthotroper Platten
- Nr. 8 Albert Meyers: April 1977
Ein Beitrag zum optimalen Entwurf von schnelllaufenden Zentrifugenschalen
- Nr. 9 Berend Fischer: April 1977
Zur zyklischen, elastoplastischen Beanspruchungen eines dickwandigen Zylinders bei
endlichen Verzerrungen
- Nr. 10 Wojciech Pietraszkiewicz: Mai 1977
Introduction to the Non-Linear Theory of Shells
- Nr. 11 Wilfried Ullenboom: Juni 1977
Optimierung von Stäben unter nichtperiodischer dynamischer Belastung
- Nr. 12 Jürgen Guldenpfennig: Juli 1977
Anwendung eines Modells der Vielkristallplastizität auf ein Problem gekoppelter elas-

toplastischer Wellen

- Nr. 13 Pawel Rafalski: März 1978
Minimum Principles in Plasticity
- Nr. 14 Peter Hilgers: Juli 1978
Der Einsatz eines Mikrorechners zur hybriden Optimierung und Schwingungsanalyse
- Nr. 15 Hans-Albert Lauert: August 1979
Optimierung von Stäben unter dynamischer periodischer Beanspruchung bei Beachtung von Spannungsrestriktionen
- Nr. 16 Martin Fritz: Juli 1979
Berechnung der Auflagerkräfte und der Muskelkräfte des Menschen bei ebenen Bewegungen aufgrund von kinematographischen Aufnahmen
- Nr. 17 H. Stumpf/F. J. Biehl: Dezember 1979
Approximations and Error Estimates in Eigenvalue Problems of Elastic Systems with Application to Eigenvibrations of Orthotropic Plates
- Nr. 18 Uwe Kohlberg: Juli 1979
Variational Principles and their Numerical Application to Geometrically Nonlinear v. Karman Plates
- Nr. 19 Heinz Antes: Januar 1980
Über Fehler und Möglichkeiten ihrer Abschätzung bei numerischen Berechnungen von Schalenträgwerken
- Nr. 20 Czeslaw Wozniak: März 1980
Large Deformations of Elastic and Non-Elastic Plates, Shells and Rods
- Nr. 21 Maria K. Duszek: Juni 1980
Problems of Geometrically Non-Linear Theory of Plasticity
- Nr. 22 Burkhard von Bredow: Dezember 1980
Optimierung von Stäben unter stochastischer Erregung
- Nr. 23 Jürgen Preuss: Februar 1981
Optimaler Entwurf von Tragwerken mit Hilfe der Mehrzielmethode
- Nr. 24 Ekkehard Großmann: Februar 1981
Kovarianzanalyse mechanischer Zufallsschwingungen bei Darstellung der mehrfach-

korrelierten Erregungen durch stochastische Differentialgleichungen

- Nr. 25 Dieter Weichert: März 1981
Variational Formulation and Solution of Boundary-Value Problems in the Theory of Plasticity and Application to Plate Problems
- Nr. 26 Wojciech Pietraszkiewicz: Juni 1981
On Consistent Approximations in the Geometrically Non-Linear Theory of Shells
- Nr. 27 Georg Zander: September 1981
Zur Bestimmung von Verzweigungslasten dünnwandiger Kreiszyylinder unter kombinierter Längs- und Torsionslast
- Nr. 28 Pawel Rafalski: September 1981
An Alternative Approach to the Elastic-Viscoplastic Initial-Boundary Value Problem
- Nr. 29 Heinrich Oeynhausen: November 1981
Verzweigungslasten elastoplastisch deformierter, dickwandiger Kreiszyylinder unter Innendruck und Axialkraft
- Nr. 30 F.-J. Biehl: Dezember 1981
Zweiseitige Eingrenzung von Feldgrößen beim einseitigen Kontaktproblem
- Nr. 31 Maria K. Duszek: Juni 1982
Foundations of the Non-Linear Plastic Shell Theory
- Nr. 32 Reinhard Piltner: Juli 1982
Spezielle finite Elemente mit Löchern, Ecken und Rissen unter Verwendung von analytischen Teillösungen
- Nr. 33 Petrisor Mazilu: Dezember 1982
Variationsprinzip der Thermoplastizität I. Wärmeausbreitung und Plastizität
- Nr. 34 Helmut Stumpf: Dezember 1982
Unified Operator Description, Nonlinear Buckling and Post-Buckling Analysis of Thin Elastic Shells
- Nr. 35 Bernd Kaempf: März 1983
Ein Exremal-Variationsprinzip für die instationäre Wärmeleitung mit einer Anwendung auf thermoelastische Probleme unter Verwendung der finiten Elemente
- Nr. 36 Alfred Kraft: Juli 1983

Zum methodischen Entwurf mechanischer Systeme im Hinblick auf optimales Schwingungsverhalten

- Nr. 37 Petrisor Mazilu: August 1983
Variationsprinzip der Thermoplastizität II. Gekoppelte thermomechanische Prozesse
- Nr. 38 Klaus-Detlef Mickley: November 1983
Punktweise Eingrenzung von Feldgrößen in der Elastomechanik und ihre numerische Realisierung mit Fundamental-Splinefunktionen
- Nr. 39 Lutz-Peter Nolte: Dezember 1983
Beitrag zur Herleitung und vergleichende Untersuchung geometrisch nichtlinearer Schalentheorien unter Berücksichtigung großer Rotationen
- Nr. 40 Ulrich Blix: Dezember 1983
Zur Berechnung der Einschnürung von Zugstäben unter Berücksichtigung thermischer Einflüsse mit Hilfe der Finite-Element-Methode
- Nr. 41 Peter Becker: Februar 1984
Zur Berechnung von Schallfeldern mit Elementmethoden
- Nr. 42 Diemar Bouchard: Februar 1984
Entwicklung und Anwendung eines an die Diskrete-Fourier-Transformation angepaßten direkten Algorithmus zur Bestimmung der modalen Parameter linearer Schwingungssysteme
- Nr. 43 Uwe Zdebel: Dezember 1984
Theoretische und experimentelle Untersuchungen zu einem thermo-plastischen Stoffgesetz
- Nr. 44 Jan Kubik: April 1985
Thermodiffusion Flows in a Solid with a Dominant Constituent
- Nr. 45 Horst J. Klepp: Juni 1985
Über die Gleichgewichtslagen und Gleichgewichtsbereiche nichtlinearer autonomer Systeme
- Nr. 46 J. Makowski/L.-P. Nolte/H. Stumpf: Juli 1985
Finite In-Plane Deformations of Flexible Rods - Insight into Nonlinear Shell Problems
- Nr. 47 Franz Karl Labisch: August 1985

Grundlagen einer Analyse mehrdeutiger Lösungen nichtlinearer Randwertprobleme der Elastostatik mit Hilfe von Variationsverfahren

- Nr. 48 J. Chroscielewski/L.-P. Nolte: Oktober 1985
Strategien zur Lösung nichtlinearer Probleme der Strukturmechanik und ihre modulare Aufbereitung im Konzept MESY
- Nr. 49 Karl-Heinz Bürger: Dezember 1985
Gewichtsoptimierung rotationssymmetrischer Platten unter instationärer Erregung
- Nr. 50 Ulrich Schmid: Februar 1987
Zur Berechnung des plastischen Setzens von Schraubenfedern
- Nr. 51 Jörg Frischbier: März 1987
Theorie der Stoßbelastung ortotroper Platten und ihr experimentelle Überprüfung am Beispiel einer unidirektional verstärkten CFK-Verbundplatte
- Nr. 52 W. Tampczynski: Juli 1987
Strain history effect in cyclic plasticity
- Nr. 53 Dieter Weichert: Dezember 1987
Zum Problem geometrischer Nichtlinearitäten in der Plastizitätstheorie
- Nr. 54 Heinz Antes/Thomas Meise/Thomas Wiebe: Januar 1988
Wellenausbreitung in akustischen Medien Randelement-Prozeduren im 2-D Frequenzraum und im 3-D Zeitbereich
- Nr. 55 Wojciech Pietraszkiewicz: März 1988
Geometrically non-linear theories of thin elastic shells
- Nr. 56 Jerzy Makowski/Helmut Stumpf: April 1988
Finite strain theory of rods
- Nr. 57 Andreas Pape: Mai 1988
Zur Beschreibung des transienten und stationären Verfestigungsverhaltens von Stahl mit Hilfe eines nichtlinearen Grenzflächenmodells
- Nr. 58 Johannes Groß-Weege: Juni 1988
Zum Einspielverhalten von Flächentragwerken
- Nr. 59 Peihua LIU: Juli 1988
Optimierung von Kreisplatten unter dynamischer nicht rotationssymmetrischer Last

- Nr. 60 Reinhard Schmidt: August 1988
Die Anwendung von Zustandsbeobachtern zur Schwingungsüberwachung und Schadensfrüherkennung auf mechanische Konstruktionen
- Nr. 61 Martin Pitzer: Juli 1988
Vergleich einiger FE-Formulierungen auf der Basis eines inelastischen Stoffgesetzes
- Nr. 62 Jerzy Makowski/Helmut Stumpf: Dezember 1988
Geometric structure of fully nonlinear and linearized Cosserat type shell theory
- Nr. 63 O. T. Bruhns: Januar 1989
Große plastische Formänderungen - Bad Honnef 1988
- Nr. 64 Khanh Chau Le/Helmut Stumpf/Dieter Weichert: Juli 1989
Variational principles of fracture mechanics
- Nr. 65 Guido Obermüller: Juni 1989
Ein Beitrag zur Strukturoptimierung unter stochastischen Lasten
- Nr. 66 Herbert Diehl: Juni 1989
Ein Materialmodell zur Berechnung von Hochgeschwindigkeitsdeformationen metallischer Werkstoffe unter besonderer Berücksichtigung der Schädigung durch Scherbänder
- Nr. 67 Michael Geis: November 1989
Zur Berechnung ebener, elastodynamischer Rißprobleme mit der Randelementmethode
- Nr. 68 Günter Renker: November 1989
Zur Identifikation nichtlinearer strukturmechanischer Systeme
- Nr. 69 Berthold Schieck: November 1989
Große elastische Dehnungen in Schalen aus hyperelastischen inkompressiblen Materialien
- Nr. 70 Frank Szepan: Dezember 1989
Ein elastisch-viskoplastisches Stoffgesetz zur Beschreibung großer Formänderungen unter Berücksichtigung der thermomechanischen Kopplung
- Nr. 71 Christian Scholz: Dezember 1989
Ein Beitrag zur Gestaltoptimierung druckbelasteter Rotationsschalen

- Nr. 72 J. Badur/H. Stumpf: Dezember 1989
On the influence of E. and F. Cosserat on modern continuum mechanics and field theory
- Nr. 73 Werner Fornefeld: Januar 1990
Zur Parameteridentifikation und Berechnung von Hochgeschwindigkeitsdeformationen metallischer Werkstoffe anhand eines Kontinuums-Damage-Modells
- Nr. 74 J. Saczuk/H. Stumpf: April 1990
On statical shakedown theorems for non-linear problems
- Nr. 75 Andreas Feldmüller: April 1991
Ein thermoplastisches Stoffgesetz isotrop geschädigter Kontinua
- Nr. 76 Ulfert Rott: April 1991
Ein neues Konzept zur Berechnung viskoplastischer Strukturen
- Nr. 77 Thomas Heinrich Pingel: Juli 1991
Beitrag zur Herleitung und numerischen Realisierung eines mathematischen Modells der menschlichen Wirbelsäule
- Nr. 78 O. T. Bruhns: Dezember 1991
Große plastische Formänderungen - Bad Honnef 1991
- Nr. 79 J. Makowski/J. Chroscielewski/H. Stumpf:
Computational Analysis of Shells Undergoing Large Elastic Deformation Part I: Theoretical Foundations
- Nr. 80 J. Chroscielewski/J. Makowski/H. Stumpf:
Computational Analysis of Shells Undergoing Large Elastic Deformation Part II: Finite Element Implementation
- Nr. 81 R. H. Frania/H. Waller: Mai 1992
Entwicklung und Anwendung spezieller finiter Elemente für Kerbspannungsprobleme im Maschinenebau
- Nr. 82 B. Bischoff-Beiermann: Juli 1992
Zur selbstkonsistenten Berechnung von Eigenspannungen in polykristallinem Eis unter Berücksichtigung der Monokristallanisotropie
- Nr. 83 J. Pohé: Februar 1993
Ein Beitrag zur Stoffgesetzentwicklung für polykristallines Eis

- Nr. 84 U. Kikillus: Mai 1993
Ein Beitrag zum zyklischen Kriechverhalten von Ck 15
- Nr. 85 T. Guo: Juni 1993
Untersuchung des singulären Rißspitzenfeldes bei stationärem Rißwachstum in verfestigendem Material
- Nr. 86 Achim Menne: Januar 1994
Identifikation der dynamischen Eigenschaften von hydrodynamischen Wandlern
- Nr. 87 Uwe Folchert: Januar 1994
Identifikation der dynamischen Eigenschaften Hydrodynamischer Kopplungen
- Nr. 88 Jörg Körber: April 1994
Ein verallgemeinertes Finite-Element-Verfahren mit asymptotischer Stabilisierung angewendet auf viskoplastische Materialmodelle
- Nr. 89 Peer Schieße: April 1994
Ein Beitrag zur Berechnung des Deformationsverhaltens anisotrop geschädigter Kontinua unter Berücksichtigung der thermoplastischen Kopplung
- Nr. 90 Egbert Schopphoff: Juli 1994
Dreidimensionale mechanische Analyse der menschlichen Wirbelsäule
- Nr. 91 Christoph Beerens: Juli 1994
Zur Modellierung nichtlinearer Dämpfungsphänomene in der Strukturmechanik
- Nr. 92 K. C. Le/H. Stumpf: November 1994
Finite elastoplasticity with microstructure
- Nr. 93 O. T. Bruhns: Dezember 1994
Große plastische Formänderungen - Bad Honnef 1994
- Nr. 94 Armin Lenzen: Dezember 1994
Untersuchung von dynamischen Systemen mit der Singulärwertzerlegung - Erfassung von Strukturveränderungen
- Nr. 95 J. Makowski/H. Stumpf: Dezember 1994
Mechanics of Irregular Shell Structures
- Nr. 96 J. Chrosielewski/J. Makowski/H. Stumpf: Dezember 1994
Finite Elements for Irregular Nonlinear Shells

- Nr. 97 W. Krings/A. Lenzen/u. a.: Februar 1995
Festschrift zum 60. Geburtstag von Heinz Waller
- Nr. 98 Ralf Podleschny: April 1995
Untersuchung zum Instabilitätsverhalten scherbeanspruchter Risse
- Nr. 99 Bernd Westerhoff: Juli 1995
Eine Untersuchung zum geschwindigkeitsabhängigen Verhalten von Stahl
- Nr. 100 Marc Mittelbach: Dezember 1995
Simulation des Deformations- und Schädigungsverhaltens beim Stoßversuch mit einem Kontinuums-Damage-Modell
- Nr. 101 Ulrich Hoppe: Mai 1996
Über grundlegende Konzepte der nichtlinearen Kontinuumsmechanik und Schalentheorie
- Nr. 102 Marcus Otto: Juni 1996
Erweiterung des Kaustikenverfahrens zur Analyse räumlicher Spannungskonzentrationen
- Nr. 103 Horst Lanzerath: Juli 1996
Zur Modalanalyse unter Verwendung der Randelementemethode
- Nr. 104 Andreas Wichtmann: August 1996
Entwicklung eines thermodynamisch konsistenten Stoffgesetzes zur Beschreibung der Reckalterung
- Nr. 105 Bjarne Fossa: Oktober 1996
Ein Beitrag zur Fließflächenmessung bei vorgedehnten Stoffen
- Nr. 106 Khanh Chau Le: Dezember 1996
Kontinuumsmechanisches Modellieren von Medien mit veränderlicher Mikrostruktur
- Nr. 107 Holger Behrens: Januar 1997
Nichtlineare Modellierung und Identifikation hydrodynamischer Kupplungen mit allgemeinen diskreten Modellansätzen
- Nr. 108 Johannes Moosheimer: Juli 1997
Gesteuerte Schwingungsdämpfung mit Elektrorheologischen Fluiden
- Nr. 109 Dirk Klaus Anding: Oktober 1997

Zur simultanen Bestimmung materialabhängiger Koeffizienten inelastischer Stoffgesetze

- Nr. 110 Stephan Weng: Dezember 1997
Ein Evolutionsmodell zur mechanischen Analyse biologischer Strukturen
- Nr. 111 Michael Straßberger: Dezember 1997
Aktive Schallreduktion durch digitale Zustandsregelung der Strukturschwingungen mit Hilfe piezo-keramischer Aktoren
- Nr. 112 Hans-Jörg Becker: Dezember 1997
Simulation des Deformationsverhaltens polykristallinen Eises auf der Basis eines monokristallinen Stoffgesetzes
- Nr. 113 Thomas Nerzak: Dezember 1997
Modellierung und Simulation der Ausbreitung adiabatischer Scherbänder in metallischen Werkstoffen bei Hochgeschwindigkeitsdeformationen
- Nr. 114 O. T. Bruhns: März 1998
Große plastische Formänderungen
- Nr. 115 Jan Steinhausen: August 1998
Die Beschreibung der Dynamik von Antriebssträngen durch Black-Box-Modelle hydrodynamischer Kupplungen
- Nr. 116 Thomas Pandorf: August 1998
Experimentelle und numerische Untersuchungen zur Kerbspitzenbeanspruchung bei schlagbelasteten Biegeproben
- Nr. 117 Claus Oberste-Brandenburg: Juni 1999
Ein Materialmodell zur Beschreibung der Austenit-Martensit Phasentransformation unter Berücksichtigung der transformationsinduzierten Plastizität
- Nr. 118 Michael Märtens: Dezember 1999
Regelung mechanischer Strukturen mit Hilfe piezokeramischer Stapelaktoren
- Nr. 119 Dirk Kamarys: Dezember 1999
Detektion von Systemveränderungen durch neue Identifikationsverfahren in der experimentellen Modalanalyse
- Nr. 120 Wolfgang Hiese: Januar 2000
Gültigkeitskriterien zur Bestimmung von Scherbruchzähigkeiten

- Nr. 121 Peter Jaschke: Februar 2000
Mathematische Modellierung des Betriebsverhaltens hydrodynamischer Kupplungen mit hybriden Modellansätzen
- Nr. 122 Stefan Müller: Februar 2000
Zum Einsatz von semi-aktiven Aktoren zur optimalen Schwingungsreduktion in Tragwerken
- Nr. 123 Dirk Eichel: Juni 2000
Zur Kondensation strukturdynamischer Aufgaben mit Hilfe von Polynommatrizen
- Nr. 124 Andreas Bürgel: August 2000
Bruchmechanische Kennwerte beim Wechsel im Versagensverhalten dynamisch scherbeanspruchter Risse
- Nr. 125 Daniela Lürding: März 2001
Modellierung großer Deformationen in orthotropen, hyperelastischen Schalenstrukturen
- Nr. 126 Thorsten Quent: Mai 2001
Ein mikromechanisch begründetes Modell zur Beschreibung des duktilen Verhaltens metallischer Werkstoffe bei endlichen Deformationen unter Berücksichtigung von Porenschädigung
- Nr. 127 Ndzi C. Bongmba: Mai 2001
Ein finites anisotropes Materialmodell auf der Basis der Hencky-Dehnung und der logarithmischen Rate zur Beschreibung duktiler Schädigung
- Nr. 128 Henning Schütte: August 2001
Ein finites Modell für spröde Schädigung basierend auf der Ausbreitung von Mikrorissen
- Nr. 129 Henner Vogelsang: Dezember 2001
Parameteridentifikation für ein selbstkonsistentes Stoffmodell unter Berücksichtigung von Phasentransformationen
- Nr. 130 Jörn Mosler: Dezember 2002
Finite Elemente mit sprungstetigen Abbildungen des Verschiebungsfeldes für numerische Analysen lokalisierter Versagenszustände
- Nr. 131 Karin Preusch: Mai 2003
Hierarchische Schalenmodelle für nichtlineare Kontinua mit der p-Version der Finite-Element Methode

- Nr. 132 Christoph Müller: August 2003
Thermodynamic modeling of polycrystalline shape memory alloys at finite strains
- Nr. 133 Martin Heiderich: Juni 2004
Ein Beitrag zur zerstörungsfreien Schädigungsanalyse
- Nr. 134 Raoul Costamagna: Juli 2004
Globale Materialbeziehungen für das geklüftete Gebirge
- Nr. 135 Markus Böl: Januar 2005
Numerische Simulation von Polymernetzwerken mit Hilfe der Finite-Elemente-Methode
- Nr. 136 Gregor Kotucha: August 2005
Regularisierung von Problemen der Topologieoptimierung unter Einbeziehung von Dichtegradienten
- Nr. 137 Michael Steiner: Februar 2006
Deformations- und Versagensverhalten innendruckbeanspruchter Stahlrohre durch Stoßbelastung
- Nr. 138 Dirk Bergmannshoff: Dezember 2006
Das Instabilitätsverhalten zug-/scherbeanspruchter Risse bei Variation des Belastungspfad
- Nr. 139 Olaf Schilling: Januar 2007
Über eine implizite Partikelmethode zur Simulation von Umformprozessen
- Nr. 140 Jörn Mosler: Mai 2007
On the numerical modeling of localized material failure at finite strains by means of variational mesh adaption and cohesive elements
- Nr. 141 Rainer Fechte-Heinen: Juni 2007
Mikromechanische Modellierung von Formgedächtnismaterialien

**Mitteilungen aus dem Institut für Mechanik
RUHR-UNIVERSITÄT BOCHUM
Nr. 141**

978-3-935892-16-2